В. Г. ЛЕВИЧ, Ю. А. ВДОВИН, В. А. МЯМЛИН

# КУРС ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

## Том II

## КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА. КВАНТОВАЯ СТАТИСТИКА И ФИЗИЧЕСКАЯ КИНЕТИКА

Под редакцией чл.-корр. АН СССР В. Г. ЛЕВИЧА

ИЗДАНИЕ ВТОРОЕ, ПЕРЕРАБОТАННОЕ

*Допущено Министерством высшего и среднего специального образования СССР в качестве учебного пособия для студентов физико-технических специальностей высших учебных заведений.*



ИЗДАТЕЛЬСТВО «НАУКА»
ГЛАВНАЯ РЕДАКЦИЯ
ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ЛИТЕРАТУРЫ
МОСКВА 1971

530. 1
Л 37
УДК 530. 1 (075. 8)

*Левич Вениамин Григорьевич*
*Вдовин Юрий Александрович*
*Мямлин Виктор Алексеевич*

КУРС ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

Том II

М., 1971 г., 936 стр. с илл.

Редакторы *Л. Ф. Верес, В. И. Рыдник*

Техн. редактор *С. Я. Шкляр*

Корректор *Т. С. Вайсберг*

Сдано в набор 13/VI 1971 г.
Подписано к печати 7/X 1971 г.
Бумага $60 \times 90^1/_{16}$.
Физ. печ. л. 58,5. Условн. печ. л. 58,5.
Уч.-изд. л. 58,69. Тираж 48000 экз.
Т-13397. Цена книги 2 р. 19 к. Заказ № 1058.

Издательство «Наука».
Главная редакция
физико-математической литературы.
Москва, В-71, Ленинский проспект, 15.

Ордена Трудового Красного Знамени
Ленинградская типография № 2
имени Евгении Соколовой Главполиграфпрома
Комитета по печати при Совете Министров
СССР. Измайловский проспект, 29.

$\frac{2-3-2}{77-71}$

# ОГЛАВЛЕНИЕ

## ПРЕДИСЛОВИЕ КО ВТОРОМУ ИЗДАНИЮ

Быстрое развитие теоретической физики и расширение области ее приложений сделало актуальным такие ее разделы, которые еще несколько лет назад находились в начальной стадии развития. Это определило необходимость существенной переработки второго тома «Курса теоретической физики».

Часть IV, посвященная теории электромагнитного поля в веществе, перемещена в том I. В часть V — квантовую механику включена теория $S$-матрицы, переработан и написан заново ряд параграфов. В настоящее время «Курс теоретической физики» был бы не полным, если бы в нем не нашло отражение современное состояние теории элементарных частиц. Поэтому часть V завершает глава XV, посвященная основам теории. Естественно, что сложность проблемы и стремление избежать вульгаризации привели к тому, что глава XV потребует от читателя бо́льших усилий для усвоения. Однако для чтения этой главы не потребуется какой-либо специальной подготовки.

Во втором издании «Курса теоретической физики» помещена новая, VI часть, «Квантовая статистика и физическая кинетика». Поскольку наиболее актуальные приложения теории связаны с использованием расчетного аппарата квантовой механики, физическая кинетика следует за квантовой механикой.

Часть V, «Квантовая механика», в основном написана Ю. А. Вдовиным и В. А. Мямлиным под общим руководством В. Г. Левича. При этом Ю. А Вдовиным были написаны главы II, IV, V, VI, VIII, XII и §§ 9, 95, 97, 98; В. А. Мямлиным главы IX, X, XI, XIII. Главы I, III, VII В. Г. Левичем и Ю. А. Вдовиным совместно. Глава XIV совместно Ю. А. Вдовиным и В. А. Мямлиным. В. Г. Левичем написаны §§ 67, 69, 70, 94, 96, 100, 119 и 128. Глава XV «Основы теории элементарных частиц» целиком написана А. И. Наумовым, которому мы выражаем за

это искреннюю благодарность. В. Г. Левичем проведено редактирование всего материала части V. Часть VI — «Квантовая статистика и физическая кинетика» написана В. Г. Левичем кроме §§ 48, 62, 63, написанных В. А. Мямлиным, и §§ 5 и 64, написанных всеми авторами совместно.

В заключение мы хотели бы выразить благодарность всем лицам, помогавшим нам при подготовке этой книги, в особенности В. С. Маркину, В. В. Толмачеву, А. М. Бродскому, Р. Р. Догонадзе, А. М. Головину. И. В. Савельев указал ряд опечаток и неточностей предыдущего издания, которые теперь исправлены.

Л. Д. Конкина помогла в оформлении рукописи.

Замечания читателей и студентов, пользовавшихся первым изданием книги, были для нас очень важны и нашли свое отражение во втором издании.

*Авторы*

# *ЧАСТЬ V*

# КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА

## ГЛАВА I

## ОСНОВЫ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

### § 1. Физические основы квантовой механики

Квантовая механика, как и всякая физическая теория, возникла в тесной связи с развитием новой области экспериментальных исследований. Эти исследования, начавшиеся с изучения свойств излучения черного тела, в начале нашего века быстро распространились на явление фотоэффекта, а затем на атомные системы. В рамках этой книги мы не можем последовательно осветить всю историю развития новых представлений о характере атомных процессов, имевшую своим итогом создание современной квантовой механики. Укажем лишь, что это были мучительные поиски, потребовавшие огромных усилий крупнейших физиков нашего века. Несомненно, что создание квантовой механики было величайшим триумфом современной науки. Трудности, стоявшие на пути развития квантовой механики, были связаны с тем, что свойства частиц, из которых построены атомные системы, кардинальным образом отличаются от свойств макроскопических тел. Законы классической механики и классической электродинамики оказались непригодными для описания поведения отдельных молекул и атомов, а также элементарных частиц — электронов, протонов, нейтронов и т. д. В дальнейшем элементарные частицы, а иногда отдельные атомы и молекулы мы будем объединять термином микрочастицы. Как мы увидим, отличительной особенностью микрочастиц является то, что их движение не подчиняется законам классической механики. С рядом фактов, свидетельствующих о непригодности классических представлений в области атомных процессов, мы познакомились выше, в частности в теории электромагнитного поля и особенно в статистической физике. Так, в статистической физике мы видели, что основная величина, характеризующая состояние отдельных атомов и молекул — их энергия, пробегает дискретный ряд значений.

Прямое доказательство дискретности состояний атомных систем было получено в опытах Франка и Герца (1913 г.). Как

известно, в опытах Франка и Герца пучок электронов с заданной энергией поступал в сосуд, наполненный газом. Ток электронов, прошедших через газ, как функция ускоряющего потенциала, обнаруживал ряд резких минимумов. Положение этих минимумов характерно для природы атомов газа. Такая зависимость тока от потенциала может быть истолкована следующим образом. Электроны испытывают столкновения с атомами и передают им энергию в тех случаях, когда энергия электронов имеет определенное значение, равное разности энергий двух возможных состояний атома. При этом атом переходит в состояние с большей энергией — возбужденное состояние, а в величине тока электронов появляется минимум. Если энергия электронов имеет другое значение, они испытывают лишь упругие соударения. Таким образом атом, как целое, может получать извне только определенные порции энергии. Это означает, что энергия атома принимает только дискретный ряд значений или, иначе говоря, атом обладает дискретным спектром энергий. Дискретный характер энергетических состояний влечет за собой дискретный характер атомных переходов. При переходе атома из возбужденного в более низкое энергетическое состояние разность энергий излучается в виде светового кванта.

Энергия атома не единственная величина, которая может принимать лишь дискретные или, как говорят, квантованные значения. В опытах Штерна и Герлаха было показано, что таким же дискретным спектром значений обладает и механический момент атома. В этих опытах пучок атомов проходит через неоднородное магнитное поле $\mathcal{H}$, постоянное по направлению. Выбирая это направление за ось $z$, можно написать для силы, действующей на атом, выражение $\mu_z \frac{\partial \mathcal{H}_z}{\partial z}$, где $\mu_z$ — проекция магнитного момента атома на направление поля. Если считать, что теорема о пропорциональности между магнитным и механическим моментом (см. ч. I, § 22) справедлива для атомов, то из этого следует, что средняя сила оказывается пропорциональной величине $L_z$, где $L_z$ — проекция момента количества движения атома на направление поля [1]).

Опыт Штерна и Герлаха показал, что пучок атомов отклоняется в магнитном поле, разбиваясь на ряд отдельных пучков. Это означает, что проекция механического момента атома на направление поля может принимать лишь дискретный ряд значений. Каждому допустимому значению $L_z$ отвечает свое значение силы и соответствующая величина отклонения в неоднородном магнитном поле. Таким образом, каждый из возникших пучков содержит атомы с данным значением величины $L_z$.

---

[1]) См. однако, гл. VIII.

Дискретный характер допустимых значений основных величин, характеризующих состояние атомных систем, глубоко противоречит всей совокупности представлений классической механики. Из общих положений классической механики следует, что бесконечно малая сила вызывает бесконечно малое изменение равновесного состояния системы. Поэтому все механические величины, зависящие от состояния системы, как, например, энергия, количество движения и т. п., являются непрерывными функциями состояния. Дискретность состояний и скачкообразное изменение состояний микрочастиц непосредственно противоречит указанному общему принципу.

Трудность понимания свойств микрочастиц усугубляется тем, что наряду со свойствами дискретности некоторых величин, характеризующих состояние частиц, в ряде опытов проявлялась ясно выраженная непрерывность этих же величин. Так, например, тормозное рентгеновское излучение электронов в поле ядер имеет непрерывный спектр, что свидетельствует о непрерывном изменении энергии излучающих частиц.

Оказалось, что микрочастицы удивительным образом сочетают в себе свойства обычных частиц — корпускул [1]) и свойства волн. Это основное свойство микрочастиц носит название корпускулярно-волнового дуализма.

Основной особенностью корпускул, изучаемых в классической механике, является наличие у них определенной пространственной протяженности. Идеализацией корпускулы служит материальная точка, не имеющая размеров и двигающаяся по определенной траектории.

Свойства волновых процессов в классической физике до известной степени являются обратными свойствам корпускулярных объектов. Монохроматическая волна прежде всего обладает бесконечной протяженностью в пространстве. Поэтому лишено смысла утверждение «монохроматическая волна находится в данной точке пространства». Не имеет также смысла говорить о траектории монохроматической волны. Локализация волнового процесса в пространстве неизбежно связана с созданием волнового пакета (см. ч. I, § 35). Размеры волнового пакета тем меньше, чем большее число волн с различными частотами участвует в его образовании. Это свойство волновых процессов совершенно не зависит от их физической природы, — оно справедливо для упругих, электромагнитных и других волн. Таким образом, в классической физике локализованные корпускулы и делокализованные в пространстве волновые процессы являются в известном смысле антиподами.

---

[1]) Во избежание путаницы, корпускулами мы будем называть частицы, движущиеся по законам классической механики.

Оказалось, что у микрочастиц имеет место сочетание корпускулярных и волновых свойств, необъяснимое с точки зрения обычных наглядных представлений классической физики. Выражаясь точнее, в некоторых условиях микрочастицы ведут себя как корпускулы, а в других условиях те же микрочастицы обнаруживают чисто волновые свойства. Наконец, в некоторых опытах одновременно проявляются и корпускулярные, и волновые свойства.

Корпускулярно-волновой дуализм свойств микрочастиц был первоначально обнаружен в опытах со световыми квантами. Волновые свойства электромагнитного поля достаточно хорошо известны. Отметим лишь, что корпускулярная теория Ньютона могла успешно конкурировать с волновой теорией в объяснении таких явлений, как прямолинейное распространение и преломление света. Однако эта теория была полностью оставлена после открытия интерференции, дифракции и двойного лучепреломления.

Что же касается корпускулярных свойств электромагнитного поля, то они особенно наглядно проявляются в эффекте Комптона (ч. II, § 17; см. также гл. XIV). Действительно, этот эффект допускает только одну интерпретацию — корпускулярную. Никакими соображениями, основанными на волновых представлениях, невозможно объяснить появление электронов отдачи: падающая электромагнитная волна не может вызвать движения одного из атомных электронов, не возмутив при этом движения остальных электронов. Между тем, как мы видели в § 17 ч. II, теория, основанная на представлении о соударении двух частиц — падающего фотона и атомного электрона, правильно передает закономерности процесса.

Корпускулярная природа света проявляется с такой же наглядностью при фотоэффекте, в явлении отдачи при излучении атомов и т. п. Таким образом, волновая теория света, успешно применявшаяся при рассмотрении широчайшего круга электромагнитных явлений, оказалась совершенно непригодной для объяснения ряда процессов, в которых проявлялась корпускулярная природа света.

Создавшуюся ситуацию кратко характеризовали словами — имеется дуализм свойств электромагнитного поля. Иногда свет проявляет волновую природу, иногда ведет себя как поток фотонов.

Совокупность экспериментальных данных показала, что каждому фотону следует приписать энергию $E$ и импульс $p$, равные соответственно

$$E = \hbar\omega, \tag{1,1}$$

$$p = \frac{E}{c} = \frac{2\pi\hbar}{\lambda} = \frac{\hbar}{\lambdabar}, \tag{1,2}$$

где $\hbar$ — постоянная Планка $h$, деленная на $2\pi$ и равная $\hbar = 1{,}054\cdot10^{-27}$ *эрг·сек* и $\lambda\!\!\!^{-} = \lambda/2\pi$. Оказалось далее, что корпускулярноволновой дуализм имеет место не только для фотонов, но и для всех микрочастиц.

Корпускулярные свойства микрочастиц обнаружены сравнительно давно. Особенно ярко они проявляются при наблюдениях с камерой Вильсона. Как известно, микрочастицы, проходя через камеру Вильсона, наполненную насыщенным паром, производят на своем пути ионизацию. Ионы, созданные микрочастицами, становятся центрами конденсации, которую можно непосредственно наблюдать в виде штрихообразных следов. Точно также при движении в фотоэмульсии, наносимой толстыми слоями на фотопластинку, частицы оставляют фотографическое изображение — след своей траектории. Все это заставляло думать, что микрочастицы двигаются по определенным траекториям и по своим свойствам подобны обычным корпускулам. Однако описываемые ниже опыты позволили установить, что это не так и что корпускулярно-волновой дуализм свойств является основной чертой всех микрочастиц. Следует, однако, подчеркнуть, что обнаружению волновых свойств электронов, протонов и других микрочастиц предшествовало развитие системы представлений квантовой механики, в которой существование волновых свойств микрочастиц было предсказано теоретически.

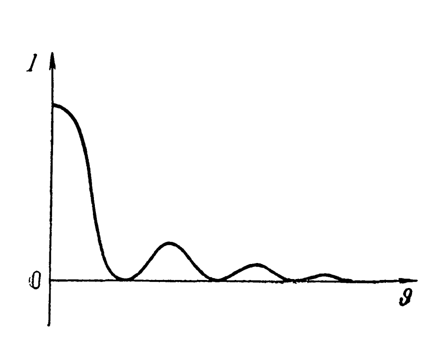
Рассмотрим следующий опыт. Через малое отверстие в непроницаемом экране последовательно пропускаются отдельные электроны, прошедшие через фиксированное ускоряющее поле. Проходя через отверстие, электроны попадают на фотопластинку, вызывая ее почернение в местах попадания. Если бы электроны двигались как корпускулы по законам классической механики и не взаимодействовали с краем экрана, то все они попадали бы в центр фотопластинки, образуя пятно почернения. В действительности, электроны должны взаимодействовать с атомами экрана. Поскольку последние находятся в тепловом движении, это взаимодействие имеет случайный характер. Поэтому, естественно, было бы ожидать, что электроны вызовут почернение фотопластинки, сходное с тем, которое вызывает молекулярный пучок, выходящий из узкого отверстия. Именно, число электронов, отклоненных от прямолинейного пути и не попавших в центр экрана, зависит от величины отклонения по закону ошибок. Интенсивность почернения, пропорциональная числу электронов, попавших в данную точку, должна была бы выражаться формулой Гаусса.

В действительности, ничего подобного на опыте не наблюдается. Если последовательно пропускать через отверстие большое число электронов, то можно обнаружить следующее:

1) существуют зоны на фотопластинке, в которые электроны никогда не попадают — «запрещенные» зоны. Эти зоны имеют характер концентрических колец вполне определенной ширины;

2) зоны попадания электронов образуют систему концентрических колец, чередующихся с «запрещенными» кольцами.

Проводя опыт достаточно долго, т. е. пропуская достаточно много электронов, можно получить полосы почернения, совершенно идентичные с полосами, возникающими при дифракции света от круглого отверстия. На рис. 1 справа изображена такая



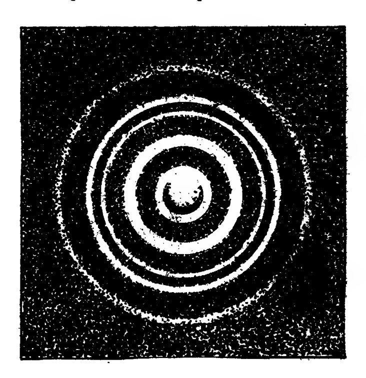


Рис. 1.

дифракционная картина[1]. Слева же расположена кривая интенсивности попаданий электронов в зависимости от угла дифракции $\vartheta$. Тот же результат получается и при другой постановке описанного опыта. Вместо того чтобы пропускать электроны поодиночке, можно направить на отверстие экрана пучок электронов. Пучок должен быть достаточно разреженным, чтобы взаимодействие между электронами не играло роли. При прохождении пучка электронов через отверстие экрана сразу возникнет дифракционное распределение интенсивности почернения фотопластинки[2].

Таким образом, движение каждого отдельного электрона существенным образом отличается от движения классической частицы, проходящей через щель в экране.

На первый взгляд может показаться, что результаты описанных измерений можно интерпретировать следующим образом:

[1]) Местам почернения фотопластинки соответствуют на рисунке светлые полосы.

[2]) С экспериментальной стороны второй метод проведения опыта является более простым, и он был осуществлен Девиссоном и Джермером в 1927 г., после создания квантовой механики. Опыт с одиночными электронами был выполнен лишь в 1948 г. В. А. Фабрикантом, Л. М. Биберманом и Н. Сушкиным.

по каким-то неизвестным причинам в природе могут реализоваться не все возможные траектории движения электронов, а лишь некоторые, допустимые. Совокупность этих допустимых траекторий определяет места попадания электронов на пластинку. Однако другие опыты показывают ошибочность подобной трактовки.

Рассмотрим непроницаемый экран с двумя отверстиями[1]). Если поочередно закрывать одно из отверстий, а через другое пропускать последовательно отдельные электроны, то после прохождения большого числа электронов на фотопластинке возникнут две описанные выше картины интерференционных полос с центральным пятном против каждого из отверстий. Откроем теперь оба отверстия и пропустим через них электроны. Допустим, что каждый из электронов двигается по определенной дозволенной траектории. Проходя через одно из отверстий, электрон вызывает почернение в определенном месте фотопластинки. Суммарная картина почернения, создаваемая большим числом электронов, при этом должна была бы являться простым наложением интенсивностей почернений, возникавших при пропускании электронов через одно отверстие. Иначе говоря, должно получиться такое почернение пластинки, что и при последовательном прохождении электронов сперва через одно, а потом через другое отверстие. Фактически, однако, картина распределения интенсивности почернения имеет совершенно иной характер. Почернение фотопластинки в точности соответствует картине дифракции от двух щелей. Это означает, что никаких возможных или допустимых траекторий электрона не существует. Подобно волне, электрон обладает интерференционными свойствами и бессмысленны были бы попытки установить, через какую из двух открытых щелей «в действительности» прошел данный электрон.

Мы видим, что с электроном связан некоторый волновой процесс, электрон обладает волновыми свойствами. Именно из-за этих волновых свойств отдельный электрон, проходящий через одно отверстие, может попасть в одни области фотопластинки и не может попасть в другие ее участки. При прохождении через две щели волновые свойства отдельного электрона проявляются в том, что на его движение влияют обе щели. Дозволенные и недозволенные для попадания участки фотопластинки совпадают с темными и светлыми зонами при дифракции от двух щелей.

Было бы неверным, однако, на основании сказанного попытаться отождествить электрон с некоторой волной. Если бы это

---

[1]) Обсуждаемый ниже опыт является схематизацией реального опыта, в котором вместо дифракции от экрана с двумя отверстиями наблюдалась дифракция электронов от кристаллической решетки.

было так, то потемнение фотопластинки, на которую попадает дифрагированная волна (отдельный электрон), было бы бледной копией потемнения, образованного многими электронами. Отдельный электрон сразу давал бы всю картину интерференции.

Мы подчеркивали, что на опыте отдельный электрон попадает в определенную точку пластинки как обычная корпускула. Отличие отдельного электрона от корпускулы проявляется в том, что места попадания на фотопластинку определяются совершенно иным законом, чем места попадания корпускулы. Таким образом, волновые свойства, как показывает дифракционный опыт, присущи каждому отдельному электрону, но наглядно выявляются они только в большом числе одинаковых экспериментов (последовательное прохождение большого числа электронов).

Заметим, что хотя всюду говорилось об электроне, это в равной степени относится и к любой другой микрочастице. Дифракционные опыты были осуществлены с нейтронами, протонами и другими микрочастицами.

Квантовомеханическая трактовка описанных дифракционных опытов будет дана в следующем параграфе. Здесь мы еще раз подчеркнем, что в дифракционных опытах с электронами проявляется тот же корпускулярно-волновой дуализм, который ранее был установлен для световых квантов.

Дифракционные опыты позволяют дать ответ на вопрос: «что такое электрон — волна или корпускула?». При этом в термины «волна» и «корпускула» мы вкладываем привычный нам классический смысл. Ответ, непосредственно вытекающий из описанных опытов, заключается в том, что электрон не является ни волной (иначе один электрон давал бы полную дифракционную картину), ни корпускулой, которая движется по определенной траектории (как это показывает опыт с двумя щелями). Электрон является микрочастицей, обладающей специфическими свойствами.

## § 2. Волновая функция

Наличие у электрона волновых свойств показывает, что электрону следует сопоставить некоторое волновое поле. Амплитуду этого волнового поля, зависящую от координат и времени, мы будем называть волновой функцией $\psi(x, y, z, t)$. Иногда ее для краткости именуют также $\psi$-функцией.

Физическое толкование волновой функции (впервые данное М. Борном) заключается в следующем: величина $|\psi(x, y, z, t)|^2 dV$ пропорциональна вероятности того, что электрон будет обнару-

жен в момент времени $t$ в элементе объема $dV$, расположенном в окрестности точки $x$, $y$, $z$.

Обозначая эту вероятность через $dW$, имеем

$$dW \sim |\psi(x, y, z, t)|^2 dV. \tag{2,1}$$

Основанием для подобной трактовки служат следующие рассуждения. В опытах с пропусканием отдельных электронов через одну или две щели мы видели, что место попадания электрона на фотопластинку являлось до известной степени случайным. Электрон мог совершенно случайно попасть в ту или иную точку будущего дифракционного кольца. Поэтому поведение электрона должно характеризоваться некоторой вероятностной функцией. Интенсивность почернения пластинки в данном месте пропорциональна числу попадающих электронов. Ясно, с другой стороны, что эта вероятностная функция должна быть связана со свойствами волнового поля. Только при этом можно совместить вероятностный характер потемнения пластинки в данном месте со строгим пространственным распределением полос потемнения. Именно совместить случайный характер попадания электрона в данную точку с его волновыми свойствами можно только допустив, что вероятность обнаружения электрона в данном месте пропорциональна интенсивности волнового поля $|\psi|^2$. Эта связь и дается формулой (2,1).

Физическая трактовка волновой функции, даваемая формулой (2,1), ясно показывает, что волновое поле $\psi(x, y, z, t)$ существенно отличается от других волновых полей, известных в классической физике. Это особенно наглядно проявляется в том, что непосредственный физический смысл имеет только величина $|\psi|^2$. Сама волновая функция может быть, вообще говоря, комплексной величиной. Кроме того, волновые функции $\psi$ и $A\psi$, где $A$ — любая постоянная, отвечают одному и тому же физическому состоянию частицы, поскольку в силу определения (2,1) обе эти волновые функции приводят к одному и тому же пространственно-временно́му распределению вероятности обнаружения частицы.

В силу теоремы сложения вероятностей (см. § 2 ч. III) определение (2,1) может быть дополнено следующим условием нормировки:

$$\int |\psi(x, y, z, t)|^2 dV = 1, \tag{2,2}$$

где стоящий слева интеграл, взятый по всему пространству, есть вероятность обнаружить частицу в момент времени $t$ в любой точке пространства. Эта вероятность естественно равна единице. Волновые функции $\psi$, удовлетворяющие условию нормировки, называются нормированными. Для нормированных волновых

функций соотношение (2,1) можно переписать в виде

$$dW = |\psi(x, y, z, t)|^2 dV = \rho(x, y, z, t)\, dV, \qquad (2,3)$$

где $\rho(x, y, z, t)$ — плотность вероятности. Вероятность $W(V, t)$ обнаружения частицы в некотором конечном объеме $V$ в момент времени $t$ по теореме сложения вероятностей равна

$$W(V, t) = \int_V dW = \int_V |\psi(x, y, z, t)|^2 dV. \qquad (2,4)$$

Условию (2,2) нельзя удовлетворить в том случае, если интеграл $\int |\psi|^2 dV$ является расходящимся. Это может иметь место, в частности, если квадрат модуля волновой функции $|\psi|^2$ не стремится к нулю на бесконечности. Физически это означает, что имеется конечная вероятность обнаружения частицы в любой точке пространства. Как проводить нормировку волновой функции в этом случае, будет показано в § 18.

Заметим, что волновая функция, нормированная условием (2,2), определена с точностью до множителя $e^{i\alpha}$, где $\alpha$ — любое действительное число, ввиду равенства

$$|e^{i\alpha}|^2 = 1.$$

Наряду с волновой функцией одной микрочастицы необходимо ввести понятие волновой функции системы микрочастиц. Пусть имеется система $N$ частиц, взаимодействующих между собой по произвольному закону. Этой системе частиц можно сопоставить волновую функцию

$$\psi(x_1, y_1, z_1, x_2, y_2, z_2, \ldots, x_i, y_i, z_i, \ldots, x_N, y_N, z_N, t),$$

где $i$ — индекс частицы.

При дальнейшем построении квантовой механики мы будем исходить из допущения, что между описанием отдельной микрочастицы и системы микрочастиц нет какой-либо принципиальной разницы и трактовки $\psi(x, y, z, t)$ и $\psi(x_1, y_1, z_1, x_2, y_2, z_2, \ldots$ $\ldots, x_N, y_N, z_N, t)$ должна быть одной и той же. Иными словами, физический смысл волновой функции системы $N$ частиц заключается в том, что величина

$$dW \sim |\psi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2, \ldots, \boldsymbol{r}_N, t)|^2 dV_1\, dV_2 \ldots dV_N \qquad (2,5)$$

дает вероятность того, что в некоторый момент времени $t$ первая частица находится в элементе объема $dV_1$, окружающем точку $\boldsymbol{r}_1$, вторая частица — в элементе объема $dV_2$, окружающем точку $\boldsymbol{r}_2$, и т. д. Здесь через $\boldsymbol{r}_i$ обозначена для краткости совокупность координат $(x_i, y_i, z_i)$. Заметим, что на основании

теоремы сложения вероятностей величина

$$dW_1 \sim dV_1 \int \psi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2, \ldots, \boldsymbol{r}_N, t)\, dV_2 \ldots dV_N \qquad (2,6)$$

представляет собой вероятность найти первую частицу в элементе объема $dV_1$, при произвольном расположении остальных частиц системы (по координатам которых выполняется интегрирование). Очевидно, что вероятность $dW_1$, даваемая формулой (2,6), должна быть идентична с определением (2,3). Аналогичные соотношения могут быть написаны и для остальных частиц системы. Таким образом $dW$ дает вероятность найти данную конфигурацию системы в пространстве.

Условие нормировки волновой функции системы $N$ частиц имеет вид:

$$\int |\psi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2, \ldots, \boldsymbol{r}_N, t)|^2\, dV_1\, dV_2 \ldots dV_N = 1. \qquad (2,7)$$

Ясно, что волновая функция системы $N$ частиц нормирована не в реальном трехмерном пространстве, а в $3N$-мерном конфигурационном пространстве.

Ввиду принципиального сходства между волновой функцией одной частицы и системы частиц мы будем обозначать волновую функцию одной буквой $\psi$. Ниже совокупность координат иногда для краткости обозначается через $x$.

Из сказанного вытекает, что величина $|\psi|^2$ должна быть истолкована как вероятность не в трехмерном, а в конфигурационном пространстве. Вместе с тем, введение волновой функции системы частиц особенно наглядно подтверждает невозможность истолкования волновой функции как величины, описывающей волновой процесс, сходный с электромагнитной или акустической волной и распространяющийся в реальном пространстве. Действительно, всякий волновой процесс в реальном пространстве характеризуется совокупностью трех переменных координат и времени. Между тем волновая функция системы $N$ частиц зависит от $3N$ координат и времени. Поэтому при истолковании $\psi$-функции как обычной волны пришлось бы либо отказаться от допущения о едином смысле волновой функции одной микрочастицы и системы микрочастиц, либо ввести гипотезу о существовании реального многомерного пространства. И то и другое находится в вопиющем противоречии с совокупностью опытных фактов.

Рассмотрим важный частный случай системы невзаимодействующих частиц. При этом обнаружение $i$-й частицы в элементе объема пространства $dV_i$, $k$-й частицы в элементе объема $dV_k$ и т. д. должны быть независимыми событиями. На основании теоремы умножения вероятностей можно в этом случае формулу

(2,5) написать как

$$dW = dW_1\, dW_2 \ldots dW_N =$$
$$= |\psi_1(\boldsymbol{r}_1, t)|^2 dV_1 |\psi_2(\boldsymbol{r}_2, t)|^2 dV_2 \ldots |\psi_N(\boldsymbol{r}_N, t)|^2 dV_N.$$

Это означает, что волновая функция системы невзаимодействующих частиц равна

$$\psi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2, \ldots, \boldsymbol{r}_N, t) = \psi_1(\boldsymbol{r}_1, t)\,\psi_2(\boldsymbol{r}_2, t) \ldots \psi_N(\boldsymbol{r}_N, t). \qquad (2,8)$$

Ниже (см. § 64) будет особо рассмотрен случай, когда система построена из тождественных микрочастиц (например, из электронов или из протонов и т. д.).

Прежде чем попытаться построить волновую функцию для простейшего случая движения микрочастицы, необходимо сделать следующее весьма важное замечание. На первый взгляд можно было бы предположить, что для описания состояний микрочастиц, которые представляют собой совершенно новые по своей физической природе объекты, необходимо ввести в физику новые понятия. Оказывается, однако, что это не совсем так. Состояние и характер движения микрочастиц можно до известной степени характеризовать величинами и терминами классической физики. На это указывает корпускулярно-волновой дуализм микрочастиц, состоящий в том, что в некоторых опытах микрочастицы проявляют себя как объекты с волновой природой, в других опытах они ведут себя как обычные корпускулы.

Мы, в известной мере, уже допустили, что к микрочастице применимы понятия классической механики, когда ввели статистическую (вероятностную) трактовку волновой функции. Действительно, утверждение «микрочастица может быть обнаружена в элементе объема $dV$» уже содержит допущение, что возможен классический подход к описанию ее состояния путем задания ее положения в пространстве. Если бы микрочастица была во всем подобна волне, то уже сама постановка вопроса, «где можно обнаружить микрочастицу», была бы лишена смысла. С другой стороны, наличие дифракционной картины позволяет в известных условиях сопоставить микрочастице другое классическое понятие — определенную длину волны $\lambda$, и говорить о длине волны, отвечающей волновой функции частицы.

Классические понятия, такие как положение частицы, длина волны и т. д., могут применяться к микрочастице лишь в известных пределах. На этом мы подробно остановимся в § 4. Самым существенным является не то, что при описании микрочастиц понятия классической физики имеют ограниченную применимость, а то, что они могут и должны использоваться при описании новых объектов, так не похожих на обычные макроскопические тела или волны.

Мы предположим, что состояние электрона, свободно движущегося в пространстве, можно характеризовать энергией $E$ и импульсом $\boldsymbol{p}$. При этом связь между энергией и импульсом дается классической формулой (релятивистские соотношения будут учтены в гл. XIII)

$$E = \frac{p^2}{2m}. \quad (2,9)$$

Допустим, что пучок электронов, прошедших через строго определенную ускоряющую разность потенциалов и приобретших определенную энергию, поступает в дифракционное устройство (на практике таким устройством обычно служит кристаллическая решетка). Формула (2,9) позволяет говорить об определенном импульсе электрона.

С другой стороны, зная дифракционную картину, можно (см. § 36 ч. IV) найти отвечающую электрону длину волны $\lambda$. Оказывается, что между величинами $\lambda$ и $\boldsymbol{p}$ существует соотношение

$$p = \frac{2\pi\hbar}{\lambda} = \hbar k. \quad (2,10)$$

Соотношение (2,10), впервые предложенное в 1924 г. де Бройлем на основе теоретических соображений, носит название формулы де Бройля. Волну, связанную с движением микрочастицы, называют волной де Бройля.

Мы видим, что формула де Бройля совпадает с формулой (1,2) для световых квантов. Частоты, отвечающие волнам де Бройля, не могут быть непосредственно определены экспериментальным путем. Естественно, однако, допустить, что к волнам де Бройля применимо то же соотношение между энергией и частотой, что и для световых квантов, т. е.

$$E = \hbar\omega. \quad (2,11)$$

Основываясь на соотношениях (2,10) и (2,11), представим волновую функцию свободной частицы в виде плоской монохроматической волны

$$\psi_{\boldsymbol{p}}(\boldsymbol{r}, t) = Ae^{i(\boldsymbol{kr} - \omega t)} = Ae^{\frac{i}{\hbar}(\boldsymbol{pr} - Et)}. \quad (2,12)$$

Ниже будет пояснено, почему $\psi_{\boldsymbol{p}}(\boldsymbol{r}, t)$ следует записывать в виде экспоненциальной функции, а не синуса или косинуса (см. § 6). Постоянная $A$ определяется условием нормировки (см. § 26).

По определению $\boldsymbol{k}$ — волновой вектор

$$\boldsymbol{k} = \frac{1}{\hbar}\boldsymbol{p}. \quad (2,13)$$

С помощью формул (2,9), (2,10) и (2,11) можно найти закон дисперсии волн де Бройля

$$\omega = \frac{1}{\hbar} E = \frac{p^2}{2m\hbar} = \frac{\hbar k^2}{2m}. \tag{2,14}$$

Соответствующая фазовая и групповая скорости равны

$$v_ф = \frac{\omega}{k} = \frac{\hbar k}{2m}, \tag{2,15}$$

$$v_{гр} = \frac{d\omega}{dk} = \frac{\hbar k}{m} = \frac{1}{m} p. \tag{2,16}$$

Формула (2,16) показывает, что групповая скорость волн де Бройля совпадает с обычной скоростью макроскопической частицы. Если бы мы взяли за исходное выражение для скорости частицы величину $v_{гр}$, то соотношение между энергией и частотой (2,11) можно было получить как следствие этого определения. Фазовая скорость волн де Бройля $v_ф$ не имеет непосредственного физического смысла. Это становится особенно ясным, если воспользоваться релятивистским выражением для связи энергии с импульсом частицы

$$E = \sqrt{p^2c^2 + m^2c^4} = \sqrt{\hbar^2c^2k^2 + m^2c^4} = \hbar\omega.$$

При этом

$$v_ф = \frac{\omega}{k} = \frac{E}{\hbar k} = \sqrt{c^2 + \frac{m^2c^4}{\hbar^2k^2}} > c,$$

т. е. $v_ф$ больше скорости света.

## § 3. Принцип суперпозиции. Разложение по плоским волнам[1])

Выше мы рассматривали явление дифракции электронов на экране с ограниченным числом щелей. Фактически, однако, наблюдается дифракция электронов от кристаллической решетки. Этот случай дифракции имеет не только практический, но и большой принципиальный интерес.

Мы видели в § 36 ч. IV, что селективное отражение рентгеновых лучей имеет место при выполнении условий Брэгга — Вульфа. Если отвлечься от несущественных деталей, то оказывается, что дифракция электронов на кристаллической решетке происходит аналогично дифракции рентгеновых лучей. При этом в результате рассеяния электронов от монокристаллического образца возникает ряд селективных отражений. Каждое из селективных отражений отвечает определенному импульсу или

---

[1]) При чтении этого параграфа рекомендуем предварительно возвратиться к § 35 ч. I.

в силу (2,10) определенной длине волны. Таким образом, кристаллическая решетка представляет собой прибор, который разлагает исходный немонохроматический пучок электронов на ряд пучков, каждый из которых отвечает электронам определенной длины волны.

Мы уже указывали, что опыт с электронным пучком эквивалентен совокупности последовательно произведенных измерений с большим числом электронов, находящихся в тождественных внешних условиях. Поэтому можно сказать, что дифракционная решетка играет роль прибора, который анализирует исходное состояние микрочастицы, разлагая его на совокупность отдельных состояний с определенными значениями импульса. Так как состоянию с определенным импульсом отвечает плоская волна вида (2,12), то, следовательно, в общем случае волновая функция, описывающая исходное состояние электрона, падающего на решетку, может быть представлена в виде суперпозиции плоских волн, т. е.

$$\psi(x, y, z, t) = \int_{-\infty}^{\infty} c(p_x, p_y, p_z)\,\psi_p(x, y, z, t)\,dp_x\,dp_y\,dp_z. \quad (3,1)$$

Физически это означает, что волновую функцию электрона в произвольном состоянии можно рассматривать как результат наложения волновых функций, отвечающих состояниям с определенным значением импульса.

Не следует удивляться тому, что один электрон (или другая микрочастица) может находиться в определенном состоянии, не имея при этом вполне определенного значения импульса. Хотя понятием импульса, перенесенным на микрочастицу из классической механики, можно пользоваться в квантовой механике, состояние микрочастицы не задается по тем же законам, что и состояние частицы в классической механике. Мы вернемся к обсуждению вопроса о характеристике состояния микрочастицы в последующих параграфах.

Выбирая коэффициент $A$ в формуле (2,12) в виде (см. § 26)

$$A = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}, \quad (3,2)$$

имеем

$$\psi(\boldsymbol{r}, t) = \int_{-\infty}^{\infty} c(\boldsymbol{p})\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\,e^{\frac{i}{\hbar}(\boldsymbol{pr}-Et)}\,d\boldsymbol{p}. \quad (3,3)$$

С математической точки зрения формула (3,3) представляет разложение функции $\psi(\boldsymbol{r}, t)$ в интеграл Фурье. Амплитуда $c(\boldsymbol{p})$ показывает, с каким весом состояние $\psi_p$ представлено

в состоянии, описываемом волновой функцией $\psi(\boldsymbol{r}, t)$. Согласно равенству Персеваля (см. приложение II, 9), имеем

$$\int |\psi|^2 dV = \int |c|^2 d\boldsymbol{p}. \tag{3,4}$$

При выборе коэффициента $A$ в виде (3,2), в равенстве (3,4) не содержится числовых коэффициентов. Естественно допустить, что $|c(\boldsymbol{p})|^2$ может быть связано с плотностью вероятности $\rho(\boldsymbol{p})$ обнаружить у частицы, находящейся в состоянии $\psi(\boldsymbol{r}, t)$, значение импульса, равное $\boldsymbol{p}$. Именно, естественно предположить, что

$$\rho(\boldsymbol{p}) = |c(\boldsymbol{p})|^2. \tag{3,5}$$

Мы пишем знак равенства, а не знак $\sim$ (пропорциональности), так как функция $\psi$ нормирована условием (2,2). При этом имеет место равенство (см. (3, 4))

$$\int |c(\boldsymbol{p})|^2 d\boldsymbol{p} = 1. \tag{3,6}$$

Мы вернемся еще к обсуждению формулы (3,5) в § 21.

Равенство (3,3) является частным случаем одного из важнейших положений квантовой механики — принципа суперпозиции. Содержание этого принципа сводится к следующему: если квантовая система может находиться в состояниях, описываемых функциями $\psi_1, \psi_2, \ldots, \psi_n$, то линейная комбинация (суперпозиция) волновых функций $\psi_n$

$$\psi = \sum_n c_n \psi_n, \tag{3,7}$$

где $c_n$ — произвольные постоянные, также является волновой функцией, описывающей одно из возможных состояний системы. Важность принципа суперпозиции заключается, в частности, в том, что он ограничивает возможные уравнения для определения $\psi$ линейными уравнениями (см. § 6). Если индекс $n$, характеризующий состояние, пробегает непрерывный ряд значений, то суммирование в формуле (3,7) должно быть заменено интегрированием. В дальнейшем мы вернемся еще к обсуждению понятия «состояние квантовой системы», а также смысла коэффициентов $c_n$ (см. § 21 и 23).

В качестве примера применения принципа суперпозиции рассмотрим свободную частицу, импульс которой не имеет строго определенного значения, но может лежать в малом интервале $\Delta\boldsymbol{p}$ около значения $\boldsymbol{p}_0$, а именно: $\boldsymbol{p}_0 - \Delta\boldsymbol{p} \leqslant \boldsymbol{p} \leqslant \boldsymbol{p}_0 + \Delta\boldsymbol{p}$. Для простоты рассмотрим случай одномерного движения. Согласно

(3,3) волновую функцию электрона можно написать в виде

$$\psi(x, t) = \int_{p_0-\Delta p}^{p_0+\Delta p} c(p) \frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}} e^{\frac{i}{\hbar}(px-Et)} dp =$$

$$= \sqrt{\frac{\hbar}{2\pi}} \int_{k_0-\Delta k}^{k_0+\Delta k} c'(k) e^{i(kx-\omega t)} dk. \qquad (3,8)$$

Коэффициент $A$ для одномерного движения равен $\frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}}$ (ср. § 26). В соответствии с результатами § 35 ч. I разложение (3,8) выражается формулой, совпадающей с (35,2) ч. I,

$$\psi(x, t) = \sqrt{\frac{\hbar}{2\pi}} 2c'(k_0) \frac{\sin\left[\Delta k \left(x - \left(\frac{d\omega}{dk}\right)_0 t\right)\right]}{\left[x - \left(\frac{d\omega}{dk}\right)_0 t\right]} e^{i(k_0x-\omega_0t)}. \qquad (3,9)$$

Формула (3,9) показывает, что суперпозиция волновых функций, отвечающих близким значениям импульсов (или волновых чисел), приводит к образованию волнового пакета, перемещающегося с групповой скоростью

$$v_{\text{гр}} = \left(\frac{d\omega}{dk}\right)_0 = \frac{1}{m} p_0.$$

Из вида волновой функции (3,9) ясно, что вероятность обнаружить микрочастицу в точке $x$ в момент времени $t$, пропорциональная $|\psi(x, t)|^2$, имеет резкий максимум, который движется со скоростью $v_{\text{гр}}$.

Необходимо подчеркнуть, что равенство (3,9) носит приближенный характер. Учет последующих членов разложения функции $\omega(k)$ привел бы к выражению для волнового пакета, ширина которого увеличивается со временем. Говорят, что происходит расплывание волнового пакета. Факт расплывания пакета непосредственно следует из того, что каждая волна, образующая пакет, движется со своей фазовой скоростью $v_{\text{ф}} = \frac{\omega}{k} = \frac{\hbar k}{2m}$.

При появлении квантовой механики делались попытки отождествить электрон с волновым пакетом, построенным из волн де Бройля. Однако факт расплывания волнового пакета свидетельствует о несостоятельности подобной трактовки. Кроме того, если бы электрон представлял пакет волн, то при этом, как и в случае одиночной волны, невозможно было бы объяснить опыт с дифракцией одиночных электронов.

## § 4. Соотношения неопределенности и связь квантовой механики с классической

Мы воспользуемся представлением волновой функции в виде волнового пакета для обсуждения весьма важного, принципиального вопроса. Речь идет о том, в какой мере и с какой степенью точности можно пользоваться понятиями классической механики в применении к микрочастицам. Мы ограничимся здесь рассмотрением понятий импульса и положения частицы в пространстве. В § 24 этот вопрос будет исследован в полной мере.

Мы видели в § 35 ч. I, что волновой пакет обладает пространственной протяженностью, даваемой формулой (35,7) ч. I. В применении к интересующему нас здесь волновому пакету (3,9) эту формулу можно записать в виде

$$\Delta p_x \Delta x \sim \hbar.$$

Поскольку имеет место расплывание пакета, не учтенное при выводе этой формулы, ее правильно представить как

$$\Delta p_x \Delta x \gtrsim \hbar. \tag{4,1}$$

Числовой множитель в формуле (4,1) будет уточнен в § 24. Аналогичным образом можно написать соотношения для двух других координат и компонент импульса:

$$\Delta p_y \Delta y \gtrsim \hbar, \tag{4,2}$$

$$\Delta p_z \Delta z \gtrsim \hbar. \tag{4,3}$$

Формулы (4,1)—(4,3) носят названия соотношений неопределенности Гейзенберга. Обсудим смысл этих неравенств, исходя из вероятностной трактовки волновой функции. Если ширина волнового пакета равна $\Delta x$, то согласно сказанному в предыдущем параграфе измерения координаты электрона покажут, что с подавляюще большой вероятностью он будет обнаружен в области пространства $\Delta x$. В этом смысле можно говорить, что координата электрона определена с точностью до величины $\Delta x$. При этом, однако, электрон, находящийся в области $\Delta x$, не описывается плоской волной и не имеет определенного значения импульса. Для образования волнового пакета шириной $\Delta x$ необходимо было создать суперпозицию плоских волн с импульсами в интервале $p_0 - \Delta p_x \leqslant p_x \leqslant p_0 + \Delta p_x$, где $\Delta p_x$ определено по формуле (4,1). Это означает, что измерения импульса электрона, локализованного в области $\Delta x$, будут приводить к значениям импульса, лежащим в указанном интервале. Иными словами, неопределенность в значении координаты электрона $\Delta x$ (локализованного в области $\Delta x$) и неопределенность в значении его импульса $\Delta p_x$ связаны соотношением (4, 1). Чем меньше ширина пакета $\Delta x$, тем больше $\Delta p_x$. Напротив, если задан ин-

тервал импульсов $\Delta p_x$, то формула (4,1) показывает, что частица с подавляюще большой вероятностью будет обнаружена в области пространства размером $\Delta x \geqslant \frac{\hbar}{\Delta p_x}$.

Из неравенства (4,1) следует, что величины $\Delta x$ и $\Delta p_x$ не могут быть равны нулю одновременно. Это означает, что координата $x$ и сопряженный с ней импульс $p_x$ не могут одновременно иметь вполне определенные значения. Таким образом, классические понятия пространственного положения и величины импульса применимы к микрочастице в определенных пределах, даваемых соотношениями Гейзенберга. Всякая попытка одновременно применить к микрочастице понятия импульса и координаты с большей точностью, вне рамок соотношений неопределенности, не имеет смысла. Это обстоятельство связано с самой природой микрочастиц, с их корпускулярно-волновыми свойствами.

В этой связи нужно предостеречь от ошибки, допускаемой некоторыми авторами, которые полагают, что соотношения неопределенности Гейзенберга дают ту степень точности, с которой могут быть определены координаты и импульс микрочастицы в рамках квантовой механики. По их мнению, для более точного одновременного определения координат и импульсов необходимо дальнейшее развитие теории.

В действительности это не так. Микрочастица является совершенно новым, отнюдь не классическим, объектом со своими характерными свойствами и законами движения. Как мы уже указывали, отличительной особенностью микрочастиц является обнаруживаемый ими дуализм волновых и корпускулярных свойств. Из дифракционных опытов вытекает, что частица не имеет траектории. Поэтому описывать ее движение, задавая точное значение координаты и импульса в каждый момент времени, как это делается в классической механике, невозможно. Однако можно указать с некоторой степенью точности величину той области пространства, в которой частица с подавляюще большой вероятностью будет обнаружена, и интервал тех значений импульса, которым она при этом обладает. Значение этих величин дается соотношениями неопределенности Гейзенберга.

Заметим, что когда частица имеет вполне определенное значение импульса $\Delta p_x = 0$, то согласно (4,1) ее положение совершенно неопределенно, т. е. $\Delta x \to \infty$. Действительно, состояние с определенным импульсом описывается плоской волной де Бройля. Для такой волны квадрат модуля $|\psi_p|^2$ постоянен, т. е. частица с одинаковой вероятностью может быть обнаружена в любой точке пространства.

С другой стороны, если задано вполне определенное положение частицы в данный момент времени, то ее импульс совер-

шенно неопределен. Может показаться, что полученное соотношение находится в противоречии с фактом существования отчетливых треков частиц в камере Вильсона или на фотопластинке. Однако это противоречие только кажущееся. Действительно, след электрона в камере Вильсона представляет капельки жидкости, образовавшиеся на созданных им ионах. Размер капелек дает степень точности, с которой может быть фиксирована координата частицы. Поскольку размеры капелек порядка $10^{-4}$ *см*, неопределенность в координате электрона также имеет порядок $10^{-4}$ *см*. Следовательно, неопределенность соответствующей компоненты импульса $\Delta p_x \sim \frac{\hbar}{\Delta x} \sim 10^{-23}$ *г · см/сек*. Так как масса электрона равна $\sim 10^{-27}$ *г*, то неопределенность в составляющей скорости, направленной перпендикулярно к треку, будет равна $\Delta v_x = \frac{1}{m} \Delta p_x = 10^4$ *см/сек*.

Но следы в камере Вильсона оставляют лишь достаточно быстрые электроны, имеющие скорость $v$ порядка $\gtrsim 10^9$ *см/сек*. Мы видим, следовательно, что в указанных условиях $\Delta v_x \ll v$ и приближенно можно говорить о движении частицы вдоль некоторой траектории в камере Вильсона.

Соотношение неопределенности Гейзенберга, записанное в виде

$$\Delta v_x \Delta x \gtrsim \frac{\hbar}{m}, \tag{4,4}$$

показывает, что понятия классической физики оказываются применимыми с тем большей степенью точности, чем больше масса частицы. Ввиду малости квантовой постоянной $\hbar$, неопределенность в значениях координаты и скорости становится пренебрежимо малой у частиц макроскопически малого, но еще не атомного размера.

Пусть, например, мы имеем тело размером около 1 микрона с массой всего $10^{-10}$ *г*. Тогда (4,4) дает

$$\Delta v_x \Delta x \sim 10^{-17} \text{ см}^2/\text{сек}.$$

Если, например, положение тела определено с точностью $10^{-6}$ *см* (1/100 его размеров), то

$$\Delta v_x \sim 10^{-11} \text{ см/сек}.$$

Скорость броуновского движения частицы с массой $10^{-10}$ *г* составляет $\sim 10^{-4}$ *см/сек*. Мы видим, что погрешность в скорости, связанная с соотношением неопределенности, пренебрежимо мала уже у такого небольшого тела. Тем более она не играет роли у макроскопических тел.

Приведенные оценки являются иллюстрацией общего важного положения квантовой механики, именуемого принципом соответствия: при переходе к пределу $\hbar \to 0$, т. е. в предположении, что эффектами, пропорциональными квантовой постоянной $\hbar$, можно пренебречь, законы и соотношения квантовой механики переходят в соответствующие законы и соотношения классической механики. (Более подробно о переходе к классической механике см. гл. V.) В частности, у частиц с большой массой отношение $\hbar/m$ столь мало, что практически ее координата и скорость имеют определенные значения. Такая частица обладает траекторией, по которой она движется в соответствии с законами классической механики. Важность принципа соответствия заключается в том, что он служит методом отыскания квантовомеханических аналогов классических величин. Квантовая механика содержит в себе классическую механику как некоторый предельный случай, отвечающий $\hbar \to 0$ (другие условия этого перехода см. в гл. V). Благодаря принципу соответствия возможно установить связь между некоторыми квантовомеханическими величинами и понятиями классической механики.

Наряду с приведенным нами рассуждением, соотношения неопределенности часто получаются из обсуждения возможной степени точности определения координаты и импульса микрочастицы в различных принципиально возможных экспериментах. Мы не будем останавливаться на разборе этих примеров, поскольку в § 24 будет дан строгий вывод соотношений неопределенности.

Заметим, что если задана область возможного движения микрочастицы, например, размер $l$ атома или ядра, то соотношения неопределенности позволяют качественно оценить значения ее импульса и энергии. Действительно, абсолютная величина импульса того же порядка, что и его неопределенность $\Delta p \sim \frac{\hbar}{l}$. Следовательно, $p \gtrsim \frac{\hbar}{l}$, а энергия частицы

$$E = \frac{p^2}{2m} \gtrsim \frac{\hbar^2}{2ml^2}. \tag{4,5}$$

Мы видим, что с уменьшением области локализации энергия возрастает. Например, для электрона в атоме $l$ порядка размеров атома, т. е. порядка $10^{-8}$ *см*. Подставляя это значение в (4,5), находим, что энергия электрона в атоме $E \gtrsim 10$ *эв*. Полученное значение дает правильный порядок величины.

Рассмотрим далее нуклон (протон или нейтрон), находящийся в ядре. Размеры ядра порядка $10^{-12}$ *см*. Полагая $l \sim 10^{-12}$ *см* и учитывая, что масса нуклона $m \sim 10^{-24}$ *г*, находим для энергии $E$ оценку, $E \gtrsim 1$ *Мэв*. Эта оценка также соответствует опытным данным.

## § 5. Принцип причинности в квантовой механике

Мы видели в предыдущем параграфе, что понятия классической физики применимы к микрочастицам лишь в известных пределах. Возникает естественный вопрос: почему мы вообще можем и должны описывать движение микрочастиц с помощью терминов классической физики? Необходимость введения классических понятий в квантовую механику связана со следующим важным обстоятельством: выяснение свойств и законов движения любых микрообъектов возможно только путем приведения их во взаимодействие с макроскопическими телами. Макроскопическое тело, взаимодействующее с микрочастицами, носит название прибора. Процесс взаимодействия между прибором и микрочастицей называется измерением.

Разумеется, прибор в этом смысле слова не обязательно является устройством для регистрации свойств микрочастиц, изготовленным искусственно. Прибор есть всякое тело, могущее изменять свое состояние в результате взаимодействия с микрообъектами и с достаточной степенью точности описываемое законами классической физики. Процесс взаимодействия прибора с микрочастицей — измерение — является объективным процессом, протекающим в пространстве и времени. Ясно, однако, что, поскольку всякое научное знание может основываться только на факте и характере указанного взаимодействия, все характеристики микрочастиц должны быть непосредственно связаны со свойствами их взаимодействия с макроскопическими телами. Это и означает, что описание микрочастицы должно обязательно включать, хотя бы частично, понятия классической физики. Разумеется, могут также существовать и такие характеристики и свойства микрочастиц, которые проявляются во взаимодействиях с приборами, но не имеют никакого классического аналога. Мы увидим, например, в гл. VIII, что такой характеристикой микрочастиц является их спин.

Взаимодействие между микрочастицами и макроскопическими телами, разумеется, существенно отличается от взаимодействия макроскопических тел между собой. Именно, при взаимодействии между одним макроскопическим телом и другим, играющим роль прибора, всегда можно считать обратное воздействие прибора на тело как угодно малым или, хотя бы, точно учесть его. Поэтому говорят, что воздействие прибора не изменяет состояние макроскопического объекта.

Иначе дело обстоит при взаимодействии физических объектов разной природы — микрочастицы и макроскопического тела — прибора. Здесь принципиально невозможно считать воздействие прибора на микрочастицу малым и несущественным. Рассмотрим один простой пример. Предположим, что совокуп-

ность электронов последовательно пропускается через щель в некотором экране. Экран со щелью является макроскопическим телом — прибором, измеряющим $y$-ю координату электрона с точностью $\Delta y$, где $\Delta y$ — ширина щели.

Состояние всех электронов до взаимодействия было одним и тем же. Пусть, например, на прибор падают электроны с определенным направлением импульса $\boldsymbol{p}$ вдоль оси $x$. При этом $p_y = 0$. Состояние прибора до взаимодействия также является заданным, но заданным макроскопическим образом. В процессе взаимодействия прибора с электроном последний локализуется в области $\Delta y$, определяемой размерами отверстия в экране. При этом состояние электрона существенно изменяется. Из состояния с определенной компонентой импульса $p_y = 0$ электрон переходит в состояние, в котором компонента импульса $p_y$ имеет значение, лежащее в интервале $\Delta p_y \sim \frac{\hbar}{\Delta y}$. Действительно, как мы знаем, при прохождении электронов через щель возникает дифракция и у электронов появляется слагающая импульса по оси $y$. Если последовательно пропускать электроны и измерять значения их компоненты импульса $p_y$, то мы будем получать всевозможные значения $p_y$, лежащие в интервале $\Delta p_y$.

Мы видим, таким образом, что воздействие прибора на электрон изменяет состояние электрона и при этом принципиально не может быть сделано малым. Хотя до измерения микрообъект и прибор находились в определенном состоянии, результат взаимодействия с прибором не является однозначным: мы получаем состояние с неопределенным значением компоненты импульса $p_y$. Мы можем лишь найти вероятность того или иного значения этой величины.

В результате проведения последовательной, как угодно большой, серии измерений мы получим не более точное значение $p_y$, а лишь более точное выражение для распределения вероятностей различных значений этой величины. Если микрообъект находился в заданных внешних условиях, то невозможно, тем не менее, точно предсказать результат измерения. Можно говорить лишь о вероятностном распределении результатов измерения. Это связано не с недостаточностью и пороками теории, но с самой природой микрочастиц. Отсюда следует, что принцип механического детерминизма не характеризует свойства микрочастиц.

Заданное начальное значение некоторой величины и определенный закон взаимодействия не определяют однозначно значение этой измеряемой величины для микрочастицы в последующие моменты времени. Таким образом, поведение отдельной микрочастицы, а не только их совокупности, определяется закономерностями статистического типа. Закон причинности для

микрочастицы приобретает следующий характер: пусть известно состояние частицы в начальный момент времени $t = 0$. Это означает, что известна ее волновая функция $\psi(\boldsymbol{r}, 0)$. Если известны все испытываемые микрочастицей взаимодействия, то, как мы увидим ниже (см. § 6), можно однозначно определить ее волновую функцию в последующие моменты времени $t > 0$.

Из смысла волновой функции вытекает, что тем самым мы можем предсказать вероятности (см. § 21) того, что характеризующие частицу величины — координата, импульс, энергия и другие, будут иметь то или иное значение в любой момент времени $t > 0$.

Сформулированный, таким образом, принцип причинности в квантовой механике имеет значительно более общий характер, чем динамическая закономерность (лапласовский детерминизм) классической механики [1]).

---

[1]) Более подробное рассмотрение вопросов, затронутых в настоящем параграфе, читатель найдет в работах В. А. Фока «Об интерпретации квантовой механики», Сборник «Философские вопросы современной физики», Изд-во АН СССР, 1959 и «Квантовая физика и философские проблемы». Сборник «Ленинизм и современное естествознание», «Мысль», 1969 г. См. также Н. Бор, Атомная физика и человеческое познание, ИЛ, 1961.

ГЛАВА II

# УРАВНЕНИЕ ШРЕДИНГЕРА

## § 6. Волновое уравнение Шредингера

В § 2 мы установили вид волновой функции, описывающей движение свободной частицы с заданным значением импульса. Эта волновая функция имеет вид плоской волны де Бройля. Мы должны теперь перейти к рассмотрению движения частиц во внешних силовых полях. Для этого необходимо найти волновую функцию, описывающую движение частицы в заданном поле сил. Оказывается возможным установить вид дифференциального уравнения, которому удовлетворяет волновая функция. Из решения этого уравнения может быть найдена сама волновая функция. Заметим прежде всего, что уравнение для волновой функции должно быть линейным. Действительно, функции, удовлетворяющие нелинейному уравнению, не отвечают, очевидно, требованиям принципа суперпозиции. Ясно, далее, что известная уже нам волновая функция, описывающая движение свободной частицы, должна являться решением искомого дифференциального уравнения в частном случае отсутствия поля. Таким образом, искомому уравнению должна удовлетворять как плоская волна де Бройля, так и произвольная суперпозиция плоских волн, и поэтому оно не должно содержать характеристик частицы. Нахождение линейного дифференциального уравнения наименьшего порядка, которому удовлетворяет плоская волна де Бройля

$$\psi(x, t) = Ae^{\frac{i}{\hbar}(pr - Et)}, \tag{6,1}$$

не представляет труда.

Для этого заметим, что

$$\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar}E\psi.$$

Кроме того,

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial z^2} = -\frac{1}{\hbar^2}(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2)\psi.$$

Учитывая, что для свободной частицы

$$\frac{p_x^2+p_y^2+p_z^2}{2m}=E, \tag{6,2}$$

находим

$$\frac{\partial\psi}{\partial t}=\frac{i\hbar}{2m}\left(\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial y^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial z^2}\right).$$

Последнее уравнение принято записывать в виде

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi. \tag{6,3}$$

Найденное линейное дифференциальное уравнение в частных производных носит название уравнения Шредингера. Оно не содержит каких-либо характеристик состояния частиц, например величины ее импульса или энергии. В него входят только масса частицы, а также универсальная постоянная $\hbar$. Уравнению (6,3) удовлетворяет, очевидно, не только волновая функция вида (6,1), представляющая волновую функцию частицы с заданным значением импульса, но и любая суперпозиция подобного рода волновых функций.

Уравнение Шредингера обладает той особенностью, что оно является уравнением первого порядка по времени и содержит множитель $i$. Последнее означает, что волновая функция должна быть комплексной.

Заметим, что в качестве волновой функции свободной частицы, казалось, можно было бы выбрать функцию, выражаемую вещественным соотношением, например, в виде бегущей волны $\psi=A\cos\frac{1}{\hbar}(\boldsymbol{pr}-Et)$. Однако при этом мы не смогли бы построить уравнение первого порядка по времени, решением которого была бы произвольная суперпозиция таких функций. То обстоятельство, что уравнение Шредингера содержит лишь первую производную от волновой функции по времени, тесно связано с выражением принципа причинности в квантовой механике (см. § 5). Действительно, если бы уравнение Шредингера содержало, например, вторую производную от волновой функции по времени, то для определения волновой функции в произвольный момент времени $t$ было бы недостаточно знания волновой функции в начальный момент времени. Именно, потребовалось бы задать в начальный момент времени также значение и первой производной от волновой функции по времени.

Среди решений уравнения (6,3) имеются решения, гармонически зависящие от времени

$$\psi(x,t)=\psi(x)e^{-\frac{i}{\hbar}Et}. \tag{6,4}$$

Подставляя (6,4) в (6,3), получим уравнение для функции, зависящей только от координат частицы,

$$\Delta\psi(x) + \frac{2mE}{\hbar^2}\psi(x) = 0. \tag{6,5}$$

Последнее уравнение определяет функцию $\psi(x)$ для свободной частицы. Проведем обобщение уравнения (6,5) на случай частицы, движущейся в силовом поле. В основу этого обобщения положено следующее допущение: энергия $E$, фигурирующая в уравнении (6,5), представляет кинетическую энергию частицы. Действительно, при свободном движении кинетическая энергия совпадает с полной. Если при искомом обобщении считать энергию $E$, фигурирующую в уравнении (6,5), полной энергией, то волновая функция, описывающая движение электронов в силовом поле, не будет зависеть от сил, действующих на частицу. Это было бы, однако, бессмысленным. Таким образом, мы приходим к выводу, что в уравнении (6,5) под $E$ следует понимать кинетическую энергию частицы. Обозначая потенциальную энергию частицы через $U(x)$, а полную — через $E$, получим

$$\Delta\psi(x) + \frac{2m}{\hbar^2}(E - U(x))\psi(x) = 0. \tag{6,6}$$

Уравнение (6,6) представляет искомое обобщение волнового уравнения Шредингера на случай частицы, движущейся в произвольном потенциальном поле, не зависящем от времени. При этом (6,6) определяет зависимость волновой функции только от координат. Зависимость от времени по-прежнему определяется соотношением (6,4).

Уравнение (6,6) называется уравнением Шредингера для стационарных состояний. Действительно, плотность вероятности измерения координат частицы, находящейся в состоянии (6,4), не зависит от времени

$$|\psi(x, t)|^2 = |\psi(x, 0)|^2. \tag{6,7}$$

В § 28 будет показано, что вероятности измерения других физических величин в состоянии (6,4) также не зависят от времени.

Заменяя с помощью (6,4) величину $E\psi$ на производную по времени $\frac{\partial\psi}{\partial t}$, приходим к общему волновому уравнению Шредингера

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi + U\psi, \tag{6,8}$$

где волновая функция $\psi$ зависит от координат $x$, $y$, $z$, и времени $t$.

Уравнение (6,8) является основным уравнением квантовой механики.

Волновое уравнение Шредингера (6,8) играет в квантовой механике ту же роль, что уравнение Ньютона в классической механике. Его можно было бы назвать уравнением движения квантовой частицы. Задать закон движения частицы в квантовой механике — это значит определить значение $\psi$-функции в каждый момент времени и в каждой точке пространства.

Необходимо указать, что проведенные рассуждения не являются выводом уравнения Шредингера в строгом смысле этого слова. Подобно уравнениям Ньютона и Максвелла уравнение Шредингера явилось, с одной стороны, обобщением известных опытных данных, а с другой стороны, было великим научным предвидением.

Мы увидим в дальнейшем, как из уравнения Шредингера вытекает дискретность уровней энергии. Будет ясно также, что уравнение Шредингера удовлетворяет принципу соответствия. Правильность уравнения Шредингера и толкования смысла фигурирующей в нем волновой функции подтверждается огромным опытным материалом современной атомной и ядерной физики. Для получения закона движения частицы — волновой функции $\psi(x, t)$, помимо уравнения Шредингера, должны быть заданы начальные и граничные условия. Поскольку уравнение Шредингера является уравнением первого порядка по времени, необходимо задать начальное значение волновой функции $\psi(x, 0)$.

Система граничных условий в общем случае сводится к требованию однозначности и непрерывности волновой функции и ее первых производных, а также выполнению некоторых условий нормировки. Последние обычно сводятся к условию ограниченности волновой функции по модулю. Совокупность начального условия и условий однозначности, непрерывности и конечности волновой функции и ее первых производных позволяет найти, в принципе, единственное решение уравнения Шредингера — волновую функцию $\psi(x, t)$. Иными словами, если задано начальное значение волновой функции, то из решения уравнения Шредингера можно однозначно определить состояние квантовой системы для любого последующего момента времени $t > 0$. Именно, для $t > 0$ можно найти волновую функцию системы $\psi(x, t)$.

Мы увидим в § 23, что задание $\psi(x, t)$ является характеристикой квантовой частицы в такой же мере полной, как, например, задание траектории частицы в классической механике. Заметим еще, что в некоторых задачах квантовой механики потенциальную энергию удобно аппроксимировать разрывной функцией. В точке разрыва потенциальной энергии волновая

функция и ее первые производные должны оставаться непрерывными. Производная от волновой функции испытывает скачок лишь на поверхности бесконечно большого разрыва потенциальной энергии.

Уравнение Шредингера, как и уравнения движения классической механики, допускает «обращение во времени».

Действительно, уравнение (6, 8) не изменяется при преобразовании $t \to -t$ и при переходе к комплексно сопряженной функции $\psi^*$. Следовательно, обращенный во времени процесс описывается волновой функцией $\psi_{обр}(x, t)$, причем

$$\psi_{обр}(x, t) = \psi^*(x, -t). \tag{6,9}$$

Отметим, что при движении в магнитном поле обращение во времени имеет место лишь при изменении направления магнитного поля на обратное (см. § 27). Более подробно вопрос об обращении времени мы рассмотрим в § 98.

## § 7. Плотность потока вероятности

Волновая функция, описывающая движение частицы, вообще говоря, изменяется в пространстве и времени. Однако это изменение не может быть произвольным.

Именно, имеет место некоторый закон сохранения. Для формулировки этого закона рассмотрим интеграл $\int\limits_V |\psi|^2\, dV$, представляющий вероятность нахождения частицы в объеме $V$. Поступая так же, как и при выводе закона сохранения заряда (см. § 5 ч. I), найдем производную от последнего интеграла по времени. Для вычисления $\frac{\partial\psi}{\partial t}$ и $\frac{\partial\psi^*}{\partial t}$ воспользуемся уравнением Шредингера (6,8) и уравнением, сопряженным ему.

Тогда получим

$$\frac{\partial}{\partial t}\int \psi\psi^*\, dV = \int\left(\frac{\partial\psi}{\partial t}\psi^* + \psi\frac{\partial\psi^*}{\partial t}\right) dV = \frac{\hbar}{2mi}\int(\psi\,\Delta\psi^* - \psi^*\,\Delta\psi)\, dV =$$
$$= \frac{\hbar}{2mi}\int \operatorname{div}(\psi\,\nabla\psi^* - \psi^*\,\nabla\psi)\, dV. \tag{7,1}$$

Воспользовавшись теоремой Гаусса — Остроградского, имеем

$$\int\limits_V \operatorname{div}(\psi\,\nabla\psi^* - \psi^*\,\nabla\psi)\, dV = \oint\limits_S (\psi\,\nabla\psi^* - \psi^*\,\nabla\psi)\, d\mathbf{S},$$

где поверхность $S$ охватывает объем $V$. Поэтому

$$\frac{\partial}{\partial t}\int\limits_V |\psi|^2\, dV = \frac{\hbar}{2mi}\oint\limits_S (\psi\,\nabla\psi^* - \psi^*\,\nabla\psi)\, d\mathbf{S}. \tag{7,2}$$

Введем вектор $j$, определенный соотношением

$$j = \frac{\hbar}{2mi}(\psi^* \nabla\psi - \psi\nabla\psi^*). \tag{7,3}$$

Тогда (7,2) перепишется в виде

$$-\frac{\partial}{\partial t}\int\limits_V |\psi|^2 dV = \oint\limits_S j_n\, dS. \tag{7,4}$$

Формула (7, 4) показывает, что плотность вероятности удовлетворяет закону сохранения, а введенный нами вектор $j$ имеет смысл плотности потока вероятности. Соотношение (7,4) может быть переписано в дифференциальной форме в виде уравнения непрерывности

$$\frac{\partial|\psi|^2}{\partial t} + \operatorname{div} j = 0. \tag{7,5}$$

Интеграл от нормальной составляющей вектора $j$ по некоторой поверхности представляет вероятность того, что частица пересечет указанную поверхность в единицу времени.

Рассмотрим, в частности, свободное движение. Волновую функцию возьмем в виде плоской волны $\psi = Ae^{\frac{i}{\hbar}(pr - Et)}$. Используя соотношение (7,3), получаем

$$j = \frac{1}{m}p|A|^2. \tag{7,6}$$

Применим теперь соотношение (7, 4) ко всему пространству, т. е. будем считать поверхность $S$ бесконечно удаленной. Если $\psi$ является квадратично-интегрируемой функцией, то подынтегральная функция в интеграле по поверхности убывает быстрее, чем $\frac{1}{r^4}$, а поверхность интегрирования растет пропорционально $r^2$. В итоге интеграл по поверхности в (7,4) обращается в нуль. Если же $\psi$ не стремится указанным образом к нулю при $r \to \infty$, как, например, в случае плоской волны, то на бесконечности имеется поток частиц. Если этот поток является стационарным, то волновую функцию можно нормировать так, что вектор $j$ представляет вектор плотности потока частиц.

Заметим, наконец, что плотность потока $j$ заведомо обращается в нуль, если состояние системы описывается действительной волновой функцией $\psi$, что непосредственно следует из формулы (7, 3).

Соотношение (7,5), записанное в форме

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + \operatorname{div} j = 0. \tag{7,7}$$

можно трактовать как закон сохранения числа частиц (ср. § 5 ч. I).

## § 8. Частица в одномерной прямоугольной потенциальной яме

Прежде чем перейти к рассмотрению реальных атомных систем, обсудим общие свойства решений уравнения Шредингера на некоторых простейших моделях. Рассмотрим прежде всего одномерное движение частицы в потенциальном поле, определенном следующим образом:

$$U(x)=\begin{cases} 0 & \text{при } 0<x<l, \\ \infty & \text{при } x\leqslant 0 \text{ и } x\geqslant l. \end{cases}$$

Подобное потенциальное поле мы будем именовать бесконечно глубокой потенциальной ямой. Ясно, что в такой яме частица может двигаться только в области пространства $0\leqslant x\leqslant l$.

На границе ямы на частицу действуют сколь угодно большие силы, которые не позволяют ей выйти наружу, так что частица как бы заключена в некоторой области пространства, ограниченной идеально отражающими стенками. Оказывается, что на таком простейшем примере можно будет установить ряд свойств квантовомеханических систем. Существенно, что эти свойства не связаны с моделью, а имеют общий характер. Кроме того, интерес к этой задаче определяется также и тем, что модель потенциальной ямы часто с успехом используется для грубого описания ряда систем, например электронов в металле или нуклонов в ядре.

Решение уравнения Шредингера следует написать в двух областях: вне потенциальной ямы и внутри нее. Поскольку частица не может находиться вне потенциальной ямы, ее волновая функция равна нулю вне промежутка $0<x<l$. Из условия непрерывности следует, что она равняется нулю также и в точках $x=0$ и $x=l$, т. е.

$$\psi(0)=\psi(l)=0. \tag{8,1}$$

Требование (8, 1) служит граничным условием для решения уравнения Шредингера внутри потенциальной ямы. В области $0<x<l$ уравнение Шредингера для стационарных состояний (6,6) имеет вид

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2}=E\psi. \tag{8,2}$$

Решение последнего уравнения можно, очевидно, записать как

$$\psi=A\sin(kx+\alpha), \tag{8,3}$$

где $k=\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$. Используем теперь граничные условия (8,1). Из соотношения $\psi=0$ при $x=0$ следует $\alpha=0$. Условие

$\psi(l) = 0$ дает

$$kl = n\pi, \tag{8,4}$$

где $n$ — любое целое число, большее нуля. В дальнейшем оно будет именоваться квантовым числом. При $n = 0$ мы имели бы $\psi \equiv 0$, что означало бы отсутствие частицы во всем пространстве. Условие (8, 4) позволяет найти возможные значения энергии частицы

$$E_n = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ml^2} n^2. \tag{8,5}$$

Мы видим, что уравнение Шредингера имеет решения, удовлетворяющие граничным условиям только при дискретных значениях квантового числа $n$. Таким образом, энергия частицы в бесконечно глубокой потенциальной яме оказывается квантованной. Дискретность энергии возникла естественным образом, без каких-либо дополнительных предположений. В данном случае она оказалась непосредственно следующей из граничных условий, налагаемых на волновую функцию на концах промежутка интегрирования. Состояние частицы с наименьшей возможной энергией будет в дальнейшем именоваться нормальным или основным, все остальные состояния — возбужденными. Энергия нормального состояния частицы в бесконечно глубокой потенциальной яме получается из формулы (8,5) при $n = 1$:

$$E_1 = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ml^2}. \tag{8,6}$$

Заметим, что значение минимальной энергии частицы находится в соответствии с принципом неопределенности. Действительно, неопределенность координаты частицы $\Delta x \sim l$. Неопределенность импульса $\Delta p$ порядка $\frac{\hbar}{l}$. Так как $p \geqslant \Delta p$, то минимальная энергия частицы оказывается равной

$$\frac{p^2}{2m} \gtrsim \frac{\hbar^2}{2ml^2},$$

что по порядку величины совпадает с (8, 6).

Определим теперь расстояние между соседними уровнями энергии ($\Delta n = 1$):

$$\Delta E_n = E_{n+1} - E_n = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ml^2}(2n+1).$$

Расстояние между уровнями увеличивается с уменьшением массы частицы и размеров области ее движения $l$. Так, например, для электрона ($m \sim 10^{-27}$ *г*), заключенного в области $l \sim 5 \cdot 10^{-8}$ *см*, находим $\Delta E \sim 1$ *эв*. Напротив, в случае молекулы с $m \sim 10^{-23}$ *г*, движущейся, например, в области $l \sim 10$ *см*, расстояние между уровнями составляет $\Delta E \sim 10^{-20}$ *эв*. Это рас-

стояние настолько мало, например, по сравнению с $kT = 0{,}025$ *эв*, что практически энергию молекулы можно считать непрерывно изменяющейся величиной.

Найдем отношение $\frac{\Delta E_n}{E_n}$, т. е. относительное расстояние между уровнями энергии. Мы видим, что $\frac{\Delta E_n}{E_n} \sim \frac{1}{n}$ и стремится к нулю при очень больших $n$. Дискретность квантовых состояний перестает проявляться при больших квантовых числах и фактически наступает переход к непрерывному изменению энергии.

Рассмотрим несколько подробнее свойства волновых функций частицы в потенциальной яме. Волновая функция, отвечающая $n$-му уровню энергии, имеет вид

$$\psi_n = A_n \sin \frac{\pi n}{l} x. \tag{8,7}$$

Постоянную $A_n$ определим из условия нормировки

$$\int_0^l |\psi_n|^2 dx = 1.$$

Тогда

$$|A_n|^2 \int_0^l \sin^2 \frac{n\pi}{l} x\, dx = |A_n|^2 \int_0^l \frac{1}{2}\left(1 - \cos \frac{2n\pi}{l} x\right) dx = |A_n|^2 \frac{l}{2} = 1.$$

Отсюда

$$A_n = \sqrt{\frac{2}{l}}. \tag{8,8}$$

Таким образом, значение постоянной не зависит от квантового числа $n$.

Плотность вероятности $|\psi|^2$ нахождения частицы в различных точках внутри ямы иллюстрируется на рис. 2. В классической механике частица, движущаяся в потенциальной яме, с равной вероятностью может находиться в любой точке внутри ямы (прямая на рис. 2). Действительно, вероятность $dW_{\text{кл}}$ обнаружения частицы в интервале $dx$ пропорциональна времени $dt$ нахождения частицы в этом интервале:

$$dW_{\text{кл}} \sim dt = \frac{1}{v} dx.$$

Поскольку на частицу внутри ямы никакие силы не действуют, она движется с постоянной скоростью $v$ и, следовательно, $dW_{\text{кл}}$ не зависит от $x$. При увеличении квантового числа $n$

(энергии частицы) максимумы распределения вероятностей стремятся сблизиться друг с другом. В пределе $n \to \infty$ распределение вероятностей, получаемое из квантовомеханического расчета, приводит к тем же результатам, что и классическое распределение. Это следует из того, что функция $\sin^2 \frac{\pi n}{l} x$ быстро осциллирует при изменении $x$ и при интегрировании по любому конечному интервалу может быть заменена на $^1/_2$. Таким образом, рассмотрение простейшей квантовомеханической системы приводит нас к следующим выводам, имеющим, как мы убедимся в дальнейшем, совершенно общий характер:

1) энергия микрочастицы, движущейся в потенциальной яме, пробегает дискретный ряд значений;

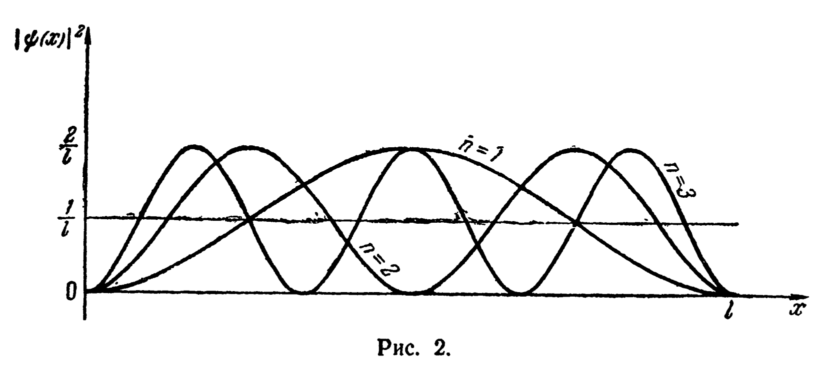



Рис. 2.

2) даже при $E = E_1$ (нормальное состояние) частица не находится в состоянии полного покоя с кинетической энергией, равной нулю;

3) дискретный характер энергетических уровней проявляется при малой массе частиц и малых размерах области, в которой происходит движение;

4) при больших значениях квантовых чисел квантовомеханические соотношения переходят в формулы классической физики. Последнее утверждение является частным случаем общего принципа соответствия, с которым мы будем еще неоднократно встречаться.

В дальнейшем при рассмотрении квантового осциллятора или атомных систем мы увидим, что квантование состояний может иметь место в системах, не ограниченных какими-либо непроницаемыми стенками. Вместе с тем мы увидим, что наличие дискретных энергетических состояний не является непременным признаком квантовомеханических систем. В некоторых случаях квантовомеханические системы обладают непрерывным спектром.

## § 9. Частица в трехмерной прямоугольной потенциальной яме

Рассмотрим теперь более сложный случай движения частицы в трехмерной бесконечно глубокой потенциальной яме. Будем считать, что область пространства, в которой движется частица, определяется неравенствами $0 < x < l_1$; $0 < y < l_2$; $0 < z < l_3$. Волновое уравнение в этом случае можно записать в виде

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial y^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial z^2}\right)=E\psi. \qquad (9,1)$$

Граничные условия аналогичны (8,1) и имеют вид

$$\psi(0,\ y,\ z)=\psi(x,\ 0,\ z)=\psi(x,\ y,\ 0)= \\ =\psi(l_1,\ y,\ z)=\psi(x,\ l_2,\ z)=\psi(x,\ y,\ l_3)=0. \qquad (9,2)$$

Решение уравнения (9,1) запишем в виде

$$\psi=B\sin k_1x\sin k_2y\sin k_3z. \qquad (9,3)$$

Подставляя $\psi$ в уравнение, получаем соотношение

$$\frac{\hbar^2}{2m}\left(k_1^2+k_2^2+k_3^2\right)=E. \qquad (9,4)$$

Из граничных условий (9,2) следует

$$\begin{aligned} k_1l_1&=n_1\pi,\\ k_2l_2&=n_2\pi,\\ k_3l_3&=n_3\pi, \end{aligned} \qquad (9,5)$$

где $n_1$, $n_2$ и $n_3$ — целые числа.

Подставляя значения $k_1$, $k_2$ и $k_3$ в (9,4) и (9,3), получаем выражения для энергии и волновой функции

$$E_{n_1,\,n_2,\,n_3}=\frac{\pi^2\hbar^2}{2m}\left(\frac{n_1^2}{l_1^2}+\frac{n_2^2}{l_2^2}+\frac{n_3^2}{l_3^2}\right), \qquad (9,6)$$

$$\psi_{n_1n_2n_3}=B\sin\frac{\pi n_1x}{l_1}\sin\frac{\pi n_2y}{l_2}\sin\frac{\pi n_3z}{l_3}. \qquad (9,7)$$

Постоянная $B$ опять определяется из условия нормировки

$$\int\limits_V|\psi_{n_1n_2n_3}|^2\,dx\,dy\,dz=1$$

и равна

$$B=\sqrt{\frac{8}{l_1l_2l_3}}. \qquad (9,8)$$

Рассмотрим, в частности, частицу, движущуюся в потенциальной яме кубической формы, т. е. случай $l_1 = l_2 = l_3 = l$. Энергия частицы в этом случае равна

$$E_{n_1, n_2, n_3} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ml^2}\left(n_1^2 + n_2^2 + n_3^2\right). \quad (9,9)$$

Из формулы (9,9) легко увидеть, что одно и то же значение энергии может осуществляться при помощи различных комбинаций чисел $n_1$, $n_2$ и $n_3$. Это означает, что несколько различных квантовых состояний с разными волновыми функциями отвечают одному и тому же значению энергии. Такие уровни энергии называются вырожденными, а число различных состояний, отвечающих данному уровню энергии, — кратностью вырождения.

Рассмотрим, например, уровень энергии

$$E = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ml^2} \cdot 6,$$

где $n_1^2 + n_2^2 + n_3^2 = 6$. Так как каждое из $n$ — целое число, большее нуля, то этому равенству можно удовлетворить тремя различными комбинациями чисел $n_1$, $n_2$, $n_3$:

1) $n_1 = 2, \quad n_2 = 1, \quad n_3 = 1,$
2) $n_1 = 1, \quad n_2 = 2, \quad n_3 = 1,$
3) $n_1 = 1, \quad n_2 = 1, \quad n_3 = 2.$

Таким образом, данному уровню энергии отвечают 3 различных состояния $\psi_{211}$, $\psi_{121}$, $\psi_{112}$. Следовательно, кратность вырождения данного уровня равна трем. С явлением вырождения мы часто будем сталкиваться при рассмотрении более сложных систем, например, атомов.

## § 10. Линейный осциллятор

Переходя к более сложным квантовомеханическим системам, мы остановимся на теории линейного гармонического осциллятора. Такой осциллятор представляет квантовый аналог частицы, совершающей малые линейные колебания около положения равновесия. Примером малых колебаний в атомных системах могут служить малые колебания атомов в молекуле (ср. § 41 ч. III).

Не менее важным примером может служить также тепловое движение кристалла, которое может быть представлено в виде совокупности линейных гармонических осцилляторов. С задачей о гармоническом осцилляторе мы встретимся также и в квантовой электродинамике, где произвольное электромагнитное поле

представляется в виде суперпозиции независимых квантовых осцилляторов (см. § 101).

Приведенные примеры показывают, что теория линейного гармонического осциллятора является одной из важных задач квантовой механики.

Потенциальная энергия линейного гармонического осциллятора дается известной формулой $U=\frac{m\omega^2x^2}{2}$. Поэтому уравнение Шредингера (6,6) для линейного гармонического осциллятора имеет вид

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2}+\frac{m\omega^2x^2}{2}\psi=E\psi. \tag{10,1}$$

При его решении удобно перейти к безразмерным переменным

$$\xi=\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x; \ \lambda=\frac{2E}{\hbar\omega}. \tag{10,2}$$

В новых обозначениях уравнение Шредингера приобретает вид

$$-\frac{d^2\psi}{d\xi^2}+\xi^2\psi=\lambda\psi. \tag{10,3}$$

Важным отличием осциллятора от рассмотренных выше примеров является то, что в этом случае движение частицы не ограничено какой-либо непроницаемой стенкой. Поэтому у осциллятора нет граничных условий, подобных условиям (8,1). Единственным требованием, которое налагается на волновую функцию осциллятора, является требование ее квадратичной интегрируемости. Мы увидим, что уравнение Шредингера для осциллятора имеет решение, удовлетворяющее последнему требованию, только при некоторых вполне определенных значениях параметра $\lambda$. Эти значения называются собственными значениями уравнения (10,3).

Для того чтобы выяснить общий характер решений последнего уравнения, рассмотрим асимптотическое поведение $\psi(\xi)$ при очень больших значениях аргумента $\xi \gg \lambda$.

При $\xi \gg \lambda$ в уравнении (10,3) можно опустить $\lambda\psi$ по сравнению с $\xi^2\psi$. При этом имеем, очевидно,

$$\frac{d^2\psi}{d\xi^2}-\xi^2\psi=0. \tag{10,4}$$

Асимптотическим решением последнего уравнения, удовлетворяющим требованию конечности при больших $\xi$, служит функция

$$\psi=A\xi^m e^{-\frac{\xi^2}{2}}. \tag{10,5}$$

где $A$ — некоторая постоянная и $m$ — любое конечное число.

Второе независимое решение уравнения (10,4) $\psi \sim e^{+\frac{\xi^2}{2}}$ неограниченно возрастает при $\xi \to \infty$ и должно быть опущено.

Будем пытаться искать решение уравнения (10,3) в виде

$$\psi = e^{-\frac{\xi^2}{2}} f(\xi), \tag{10,6}$$

где $f(\xi)$ — новая неизвестная функция, которая при $\xi \to \infty$ ведет себя как $\xi^m$. Подставляя (10,6) в (10,3), приходим к следующему уравнению для функции $f$:

$$\frac{d^2f}{d\xi^2} - 2\xi\frac{df}{d\xi} + (\lambda - 1)f = 0. \tag{10,7}$$

Поскольку точка $\xi = 0$ не является особой точкой уравнения (10,7), решение этого уравнения будем искать в виде степенного ряда

$$f(\xi) = \sum_{k=0} a_k \xi^k. \tag{10,8}$$

Производные $\frac{df}{d\xi}$ и $\frac{d^2f}{d\xi^2}$ имеют вид

$$\frac{df}{d\xi} = \sum k a_k \xi^{k-1}, \quad \frac{d^2f}{d\xi^2} = \sum k(k-1) a_k \xi^{k-2}. \tag{10,9}$$

Подставляем ряды (10,9) в уравнение (10,7), получаем

$$\sum k(k-1) a_k \xi^{k-2} - 2\xi \sum k a_k \xi^{k-1} + (\lambda - 1)\sum a_k \xi^k = 0. \tag{10,10}$$

Для того чтобы степенной ряд вида $\sum\limits_n c_n \xi^n$ был тождественно равен нулю, необходимо, чтобы обращались в нуль все коэффициенты $c_n$. Полагая равным нулю коэффициент при $\xi^k$, получаем рекуррентную формулу

$$a_{k+2} = \frac{2k + 1 - \lambda}{(k+2)(k+1)} a_k. \tag{10,11}$$

Нетрудно видеть, что при $\xi \to \infty$ такой ряд ведет себя, как $e^{\xi^2}$, так как в этом случае существенны большие $k$ и (10,11) дает $a_{k+2} \approx (^2/_k)\, a_k$. При этом функция $\psi$ (10, 6) неограниченно возрастает. Но такое решение должно быть опущено.

Мы получим решение, удовлетворяющее необходимым условиям конечности и ведущее себя при $\xi \to \infty$ как (10,5) только в том случае, если ряд (10,8) сведется к полиному, т. е. оборвется на каком-то члене. Так, предположим, что $a_n \neq 0$, $a_{n+2} = 0$. Тогда все последующие коэффициенты также обратятся в нуль, и функция $f$ сведется к полиному $n$-й степени.

Из (10,11) следует, что при этом выполняется условие

$$2n + 1 - \lambda = 0, \tag{10,12}$$

где $n$ — целое число, $n \geqslant 0$, так как $n$ — это номер члена, на котором ряд обрывается.

Подставляя в (10,2) значение $\lambda$, получаем

$$E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right). \tag{10,13}$$

Отсюда видно, что энергия осциллятора может принимать только дискретные значения, причем уровни энергии расположены друг от друга на одинаковых расстояниях, равных $\hbar\omega$.

Выпишем волновую функцию, отвечающую $n$-му возбужденному уровню энергии в виде

$$\psi_n(\xi) = A_n e^{-\frac{\xi^2}{2}} f_n(\xi), \tag{10,14}$$

где $f_n(\xi)$ — полином $n$-й степени с коэффициентами, определяемыми соотношением (10, 11), и $A_n$ — множитель, определяемый условием нормировки. Полиномы $f_n(\xi)$ носят название полиномов Чебышева — Эрмита и обозначаются через $H_n(\xi)$. Полиномы Чебышева — Эрмита часто представляют в виде

$$H_n(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2} \frac{d^n e^{-\xi^2}}{d\xi^n}. \tag{10,15}$$

Они удовлетворяют дифференциальному уравнению

$$\frac{d^2 H_n}{d\xi^2} - 2\xi \frac{dH_n}{d\xi} + 2nH_n = 0, \tag{10,16}$$

которое получается из (10, 7) с учетом условия (10, 12).

Выпишем несколько первых полиномов Чебышева — Эрмита:

$$H_0(\xi) = 1, \quad H_1(\xi) = 2\xi, \quad H_2(\xi) = 4\xi^2 - 2,$$
$$H_3(\xi) = 8\xi^3 - 12\xi, \quad H_4(\xi) = 16\xi^4 - 48\xi^2 + 12. \tag{10,17}$$

Зная общий вид полиномов Чебышева — Эрмита, можно вычислить нормировочный интеграл. При этом для $A_n$ получается[1])

$$A_n = \sqrt[4]{\frac{m\omega}{\hbar\pi}} \sqrt{\frac{1}{n!\,2^n}}. \tag{10,18}$$

Вид волновых функций для разных квантовых чисел $n$ указан на рис. 3. Отметим, что волновая функция, отвечающая основному состоянию осциллятора $n = 0$, нигде не обращается в нуль. Волновая функция $\psi_1(x)$, отвечающая уровню $n = 1$, обращается в нуль один раз при $x = 0$, $\psi_2(x)$ $(n = 2)$ обращается в нуль два раза и т. д. Точки, в которых волновая функция обращается в нуль, называются узлами волновой функции. Легко заметить,

[1]) См., например, Л. Д. Ландау и Е. М. Лифшиц, Квантовая механика, Физматгиз, 1963, стр. 94.

что число узлов волновой функции равно квантовому числу $n$. Последнее утверждение не является специфическим для осциллятора. Можно утверждать, что вообще в одномерном случае

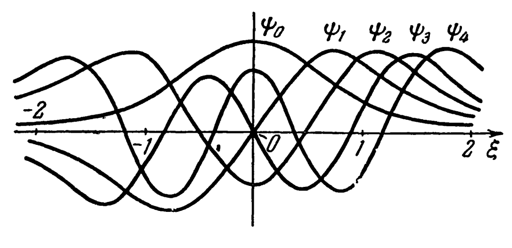



Рис. 3.

число узлов волновой функции определяется квантовым числом $n$ [1]). Вероятность найти частицу в точке $x$, в интервале $dx$ равна

$$W_n(x)\,dx = |\,\psi_n(x)\,|^2\,dx.$$

Эти вероятности для разных $n$ изображены на рис. 4. Сравним полученные выражения с вероятностью нахождения частицы в данной точке, вычисленной с помощью классической механики. Последняя определяется как отношение времени $dt$ пребывания в окрестности данной точки к периоду движения. Классическая вероятность оказывается наибольшей вблизи точек поворота $x = \pm x_0$, в которых скорость движения обращается в нуль. Напротив, в окрестности точки $x=0$ частица имеет наибольшую скорость и вероятность ее обнаружения минимальна.

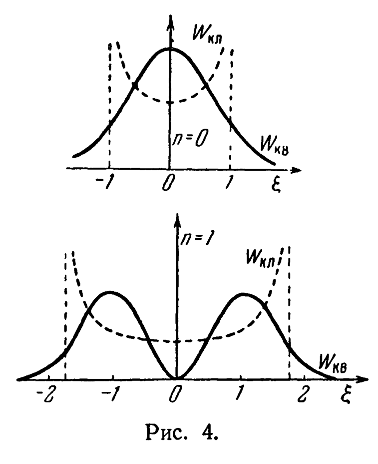



Рис. 4.

Из рассмотрения кривых рис. 4 видно, что вероятность найти квантовую частицу отлична от нуля и в классически недостижимой области за пределами точек поворота. При больших квантовых числах (рис. 5) в согласии с принципом соответствия квантовое распределение вероятности приближается к классическому.

В заключение отметим, что наименьшее возможное значение энергии осциллятора, равное $\frac{\hbar\omega}{2}$, отлично от нуля. Это озна-

[1]) Р. Курант и Д. Гильберт, Методы математической физики, Гостехиздат, 1951, т. I, стр. 382.

чает, что квантовый осциллятор никогда не может находиться в состоянии абсолютного покоя. Это обстоятельство в свою очередь связано с соотношением неопределенности. По порядку величины энергия осциллятора равна

$$E \geqslant \frac{\Delta p^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}\Delta x^2 \geqslant \frac{\Delta p^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}\left(\frac{\hbar}{\Delta p}\right)^2.$$

Рассматривая эту величину как функцию $\Delta p$, легко установить, что она минимальна при $\Delta p \sim (m\omega\hbar)^{1/2}$ и по порядку

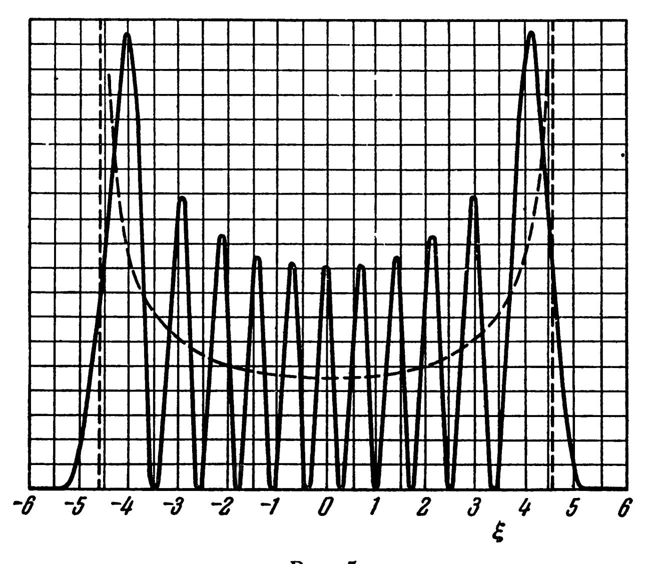



Рис. 5.

величины равна $\hbar\omega$. Экспериментально нулевая энергия $E_0$ наблюдается при рассеянии света кристаллом, находящимся при температуре, близкой к абсолютному нулю. При абсолютном нуле кристалл находится в основном (низшем) энергетическом состоянии. Тем не менее атомы совершают нулевые колебания, которые вызывают рассеяние света.

## § 11. Трехмерный осциллятор

Рассмотрим теперь движение пространственного трехмерного осциллятора. Для общности будем считать, что в трех взаимно перпендикулярных направлениях собственные частоты различны и равны соответственно $\omega_1$, $\omega_2$, $\omega_3$. Тогда потенциальная

энергия выражается формулой

$$U=\frac{m\omega_1^2}{2}x^2+\frac{m\omega_2^2}{2}y^2+\frac{m\omega_3^2}{2}z^2. \qquad (11,1)$$

Уравнение Шредингера соответственно имеет вид

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi+\frac{m}{2}\left(\omega_1^2x^2+\omega_2^2y^2+\omega_3^2z^2\right)\psi=E\psi. \qquad (11,2)$$

Будем пытаться искать решение уравнения (11,2) в виде произведения функций, каждая из которых зависит только от одной координаты

$$\psi(x,\ y,\ z)=\psi_1(x)\,\psi_2(y)\,\psi_3(z). \qquad (11,3)$$

Подставляя (11,3) в (11,2), и разделяя переменные, получаем:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi_i}{dx_i^2}+\frac{m\omega_i^2x_i^2}{2}\psi_i(x_i)=E_i\psi_i(x_i),\quad i=1,\ 2,\ 3, \qquad (11,4)$$

где $x_1=x$, $x_2=y$, $x_3=z$; $E_1+E_2+E_3=E$.

Таким образом, задача свелась к одномерной. В соответствии с этим, используя (10,13), (10,14) и (10,18), можем написать:

$$\psi_{n_1n_2n_3}(x_1,\ x_2,\ x_3)=$$

$$=\left(\frac{m^3\omega_1\omega_2\omega_3}{\hbar^3\pi^3}\right)^{1/4}\left(\frac{2^{-(n_1+n_2+n_3)}}{n_1!\,n_2!\,n_3!}\right)^{1/2}e^{-\frac{\xi_1^2+\xi_2^2+\xi_3^2}{2}}H_{n_1}(\xi_1)\,H_{n_2}(\xi_2)\,H_{n_3}(\xi_3), \qquad (11,5)$$

где $\xi_i=\sqrt{\frac{m\omega_i}{\hbar}}\,x_i$ $\quad (i=1,\ 2,\ 3)$.

Полная энергия осциллятора равна

$$E=\hbar\omega_1\left(n_1+\frac{1}{2}\right)+\hbar\omega_2\left(n_2+\frac{1}{2}\right)+\hbar\omega_3\left(n_3+\frac{1}{2}\right). \qquad (11,6)$$

В частности, для изотропного осциллятора, у которого $\omega_1=\omega_2=$ $=\omega_3=\omega$, полная энергия имеет вид

$$E_n=\hbar\omega\left(n+\frac{3}{2}\right),\ \text{где}\ \ n=n_1+n_2+n_3, \qquad (11,7)$$

т. е. $E_n$ зависит от суммы квантовых чисел $n_1$, $n_2$, $n_3$. Это значит, что данное значение энергии (данное $n$) можно получить за счет различных комбинаций $n_1$, $n_2$, $n_3$. Отсюда следует, что все уровни энергии, за исключением основного $n=0$, являются вырожденными. Нетрудно подсчитать кратность вырождения. Для этого фиксируем, кроме $n$, еще квантовое число $n_1$. Тогда число возможных троек чисел $n_1$, $n_2$, $n_3$ будет равно числу возможных значений $n_2$, т. е. равно $n-n_1+1$, так как $n_2$ может меняться

от нуля до $n - n_1$. Суммируя полученное выражение по всем возможным значениям числа $n_1$, найдем полное число комбинаций из трех квантовых чисел $n_1$, $n_2$, $n_3$, дающих в сумме заданное число $n$, т. е. кратность вырождения $n$-го уровня энергии:

$$\sum_{n_1=0}^{n} (n - n_1 + 1) = \frac{1}{2}(n+1)(n+2). \tag{11,8}$$

## § 12. Отражение и прохождение через потенциальный барьер

Из других сравнительно простых задач квантовой механики остановимся на движении частиц в поле сил, которое может быть представлено в виде потенциального барьера. Это означает, что силы действуют на частицу в некоторой ограниченной области пространства. Вне этой области частица движется как свободная. Мы увидим, что изучение движения частиц в поле, имеющем вид барьера простейшей формы, позволит выявить ряд важных и принципиально новых свойств квантовых частиц. Начнем наше рассмотрение с простейшего прямоугольного бесконечно протяженного одномерного потенциального барьера, изображенного на рис. 6. В классической механике всякая частица, двигающаяся слева направо с энергией, меньшей высоты барьера $U_0$, полностью отражается от потенциальной стенки. Область $x > 0$ является для нее недоступной, так как в этой области полная энергия частицы была бы меньше потенциальной. Это означало бы, что кинетическая энергия должна была бы быть отрицательной, что, очевидно, невозможно. Если же, напротив, $E$ больше $U_0$, то по законам классической механики частица беспрепятственно проходит над барьером, двигаясь в области $x > 0$ с меньшей кинетической энергией, равной $E - U_0$.

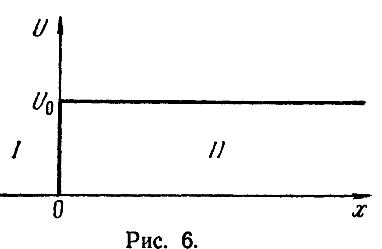


Рис. 6.

Рассмотрим теперь движение частицы в тех же условиях по законам квантовой механики. Для этого напишем уравнение Шредингера для стационарных состояний частицы в поле бесконечно протяженного барьера

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} + U(x)\psi = E\psi, \tag{12,1}$$

где $U$ — потенциальная энергия, график которой изображен на рис. 6. Решения уравнения (12, 1) удобно рассмотреть в двух

различных областях. Область $I$ простирается от $x = -\infty$ до $x = 0$, область $II$ — от $x = 0$ до $x = \infty$.

Напишем уравнение Шредингера для каждой из указанных областей:

$$\left.\begin{aligned} \frac{d^2\psi}{dx^2} + k^2\psi &= 0, \quad x < 0, \\ \frac{d^2\psi}{dx^2} + k'^2\psi &= 0, \quad x > 0, \end{aligned}\right\} \tag{12,2}$$

где введены обозначения

$$\left.\begin{aligned} k^2 &= \frac{2mE}{\hbar^2}, \\ k'^2 &= \frac{2m}{\hbar^2}(E - U_0). \end{aligned}\right\} \tag{12,3}$$

Решения этих уравнений соответственно запишутся в виде

$$\left.\begin{aligned} \psi(x) &= A_1 e^{ikx} + B_1 e^{-ikx}, \quad x < 0, \\ \psi(x) &= A_2 e^{ik'x} + B_2 e^{-ik'x}, \quad x > 0. \end{aligned}\right\} \tag{12,4}$$

В этих формулах члены вида $e^{ikx}$ представляют плоскую волну, распространяющуюся в положительном направлении оси $x$, а $e^{-ikx}$ — плоскую волну, распространяющуюся в обратном направлении. Амплитуды $A_1$, $B_1$, $A_2$ и $B_2$ являются постоянными интегрирования. Зададим поток частиц, падающих на барьер. Пусть $j_0$ — плотность потока падающих частиц. Тогда, согласно (7, 6),

$$j_0 = \frac{\hbar k}{m} | A_1 |^2.$$

Выберем для простоты поток таким, чтобы можно было положить $A_1 = 1$.

Для определения остальных постоянных рассмотрим поведение волновой функции на границе областей $I$ и $II$ в точке $x = 0$. В силу общих условий, накладываемых на волновую функцию и ее производную (см. § 6), они должны оставаться непрерывными даже в точке разрыва потенциальной энергии. Поэтому при $x = 0$ должны иметь место равенства

$$\psi(+0) = \psi(-0), \tag{12,5}$$

$$\psi'(+0) = \psi'(-0). \tag{12,6}$$

Из соотношений (12, 5) и (12, 6) можно определить еще две постоянные интегрирования $A_2$ и $B_1$. Что касается постоянной $B_2$, то мы должны положить $B_2 = 0$. Действительно, мы задаем поток частиц, распространяющихся в положительном направлении оси $x$. При $E > U_0$ (т. е. при вещественном $k'$) слагаемое

в волновой функции, пропорциональное $e^{-ik'x}$, представляет плоскую волну, распространяющуюся в обратном направлении. В области $I$ в отрицательном направлении оси $x$ распространяется отраженная волна. В области $II$ отраженной волны, очевидно, нет и, следовательно, нет волны, распространяющейся справа налево. Поэтому мы должны приравнять нулю амплитуду $B_2$ этой волны. Если же $E < U_0$ ($k'$ — чисто мнимая величина), то функция $e^{-ik'x}$ экспоненциально возрастает при $x \to -\infty$, что противоречит условию конечности волновой функции. В силу этого коэффициент $B_2$ должен быть равен нулю и при мнимом значении $k'$, т. е. при $E < U_0$.

Рассмотрим более детально случай, когда полная энергия частицы больше высоты потенциального барьера $E > U_0$.

Из соотношений (12, 5) и (12, 6), учитывая (12, 4), имеем

$$1 + B_1 = A_2,$$
$$k(1 - B_1) = k'A_2.$$

Из этих уравнений находим амплитуды $A_2$ и $B_1$:

$$B_1 = \frac{k - k'}{k + k'}, \quad A_2 = \frac{2k}{k + k'}. \tag{12,7}$$

Мы видим, что $B_1$ — амплитуда отраженной волны, отлична от нуля, хотя $E > U_0$. Это обстоятельство обусловлено волновыми свойствами частиц. Волна частично отражается, частично проходит в область $II$. Отношение плотности потока отраженных частиц $j_r$ к плотности потока падающих $j_0$ назовем коэффициентом отражения $R$. Соответственно, отношение плотности потока проходящих частиц $j_D$ к плотности потока падающих назовем коэффициентом прохождения $D$.

Учитывая (12,4), находим

$$j_r = \frac{\hbar k}{m} | B_1 |^2, \qquad j_D = \frac{\hbar k'}{m} | A_2 |^2.$$

Так как $j_0 = \frac{\hbar k}{m}$, получаем

$$\left.\begin{aligned} R &= \left(\frac{k - k'}{k + k'}\right)^2, \\ D &= \frac{4kk'}{(k + k')^2}. \end{aligned}\right\} \tag{12,8}$$

Мы видим, что автоматически выполняется соотношение

$$R + D = 1, \tag{12,9}$$

выражающее закон сохранения числа частиц.

Отметим, что выражения (12,8) оказываются симметричными по отношению к $k$ и $k'$, т. е. для частиц заданной

энергии $E$ коэффициент отражения (а также и прохождения) оказывается не зависящим от направления движения частиц. Частицы, движущиеся слева направо, т. е. против действия силы в точке $x = 0$, имеют такую же вероятность отразиться в этой точке, что и частицы той же энергии, двигающиеся справа налево, по направлению действия силы в точке $x = 0$. Это обстоятельство также обусловлено волновым характером процесса и имеет соответствующую оптическую аналогию.

Рассмотрим теперь случай $E < U_0$. При этом $k'$ — чисто мнимая величина, которую удобно записать в виде $k' = i\varkappa$, где

$$\varkappa = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(U_0 - E)}. \tag{12,10}$$

Амплитуда отраженной волны $B_1$ оказывается комплексной величиной, а коэффициент отражения $R$ равен

$$R = |B_1|^2 = \left|\frac{k - i\varkappa}{k + i\varkappa}\right|^2 = 1, \quad D = 1 - R = 0. \tag{12,11}$$

Отраженная волна запишется в виде

$$\psi_r = \frac{k - i\varkappa}{k + i\varkappa} e^{-ikx} = e^{-i\,(kx+\delta)}, \tag{12,12}$$

т. е. отражение приводит к сдвигу фазы волны.

Из (12, 12) следует, что этот сдвиг равен

$$\delta = \operatorname{arctg}\frac{2k\varkappa}{k^2 - \varkappa^2}. \tag{12,13}$$

Хотя отражение и является полным, тем не менее волновая функция в области $II$ отлична от нуля и имеет вид

$$\psi(x) = A_2 e^{-\varkappa x} = \frac{2k}{k + i\varkappa} e^{-\varkappa x} \qquad (x > 0). \tag{12,14}$$

Соответственно плотность вероятности того, что частица находится в точке $x$ в области $x > 0$, равна

$$|\psi(x)|^2 = \frac{4k^2}{k^2 + \varkappa^2} e^{-2\varkappa x}. \tag{12,15}$$

Мы видим, что поведение квантовых частиц существенно отличается от классических. Для частицы, двигающейся по законам классической механики, область $x > 0$ при $E < U_0$ являлась запретной. Напротив, частица, движущаяся по законам квантовой механики, с известной вероятностью может проникнуть в эту область. Проникновение частиц в область запрещенных энергий представляет специфически квантовый эффект, получивший название туннельного эффекта. Эффективная глубина проникновения в область $II$, т. е. расстояние $\delta x$ от границы области $II$, на котором вероятность нахождения частицы еще за-

метно отлична от нуля, как видно из формулы, имеет порядок величины $\delta x \sim \frac{1}{\varkappa}$. При $x \gg \delta x$ плотность вероятности (12, 15) оказывается экспоненциально малой.

Оценим эффективную глубину проникновения для электрона, считая, что $U_0 - E \sim 1$ *эв* $= 1{,}6 \cdot 10^{-12}$ *эрг*. Для $\delta x$ имеем, очевидно,

$$\delta x \sim \frac{\hbar}{\sqrt{2m(U_0 - E)}} \sim \frac{10^{-27}}{\sqrt{2 \cdot 10^{-27} \cdot 1{,}6 \cdot 10^{-12}}} \sim 10^{-8} \text{ см}.$$

Оценка показывает, что весь эффект может быть заметен только в области микроскопических размеров. Таким образом, как этого и следовало ожидать, туннельный эффект не может проявляться при движении макроскопических тел, для которых справедливы законы классической механики.

Чтобы фактически обнаружить частицу в области *II*, мы должны локализовать ее там в некотором малом интервале $\Delta x \lesssim \delta x$. При этом, локализуя частицу, мы заведомо меняем ее состояние (ее энергию), так как в силу соотношения неопределенностей $\Delta p \gtrsim \frac{\hbar}{\Delta x} \gtrsim \hbar\varkappa$. Частица, которую мы обнаружим где-то в области *II*, уже не будет обладать первоначальной энергией $E$.

С неопределенностью в импульсе связана неопределенность в кинетической энергии частицы:

$$\Delta T \gtrsim \frac{\Delta p^2}{2m} \gtrsim \frac{\hbar^2 \varkappa^2}{2m}.$$

Подставляя сюда выражение для $\varkappa$ (12,10), мы получаем:

$$\Delta T \gtrsim U_0 - E.$$

Рис. 7.

Таким образом, неопределенность энергии частицы, локализованной в области под барьером, больше той энергии, которой ей не хватает до высоты барьера.

Рассмотрим кратко барьер конечной протяженности, изображенный на рис. 7. Частицы падают на барьер, двигаясь в положительном направлении оси $x$. Используя результаты и обозначения предыдущего рассуждения, мы сразу можем выписать волновую функцию в трех различных областях:

$$\psi(x) = e^{ikx} + B_1 e^{-ikx}, \quad x < 0, \ U = 0, \ I \qquad (12,16)$$

$$\psi(x) = A_2 e^{ik'x} + B_2 e^{-ik'x}, \quad 0 \leqslant x \leqslant a, \ U = U_0, \ II \qquad (12,17)$$

$$\psi(x) = A_3 e^{ikx}, \quad x > a, \ U = 0. \ III \qquad (12,18)$$

При этом (как и в случае бесконечно протяженного барьера) мы опять положили амплитуду падающей волны, равной единице. Поскольку в области *III* нет отраженной волны, в качестве решения взята только волна, распространяющаяся в положительном направлении оси $x$. Выпишем условия непрерывности волновой функции и ее первой производной на границах областей, аналогичные (12, 5) и (12, 6):

$$\left.\begin{aligned} \psi(+0)&=\psi(-0), & \psi'(+0)&=\psi'(-0),\\ \psi(a+0)&=\psi(a-0), & \psi'(a+0)&=\psi'(a-0). \end{aligned}\right\} \qquad (12,19)$$

Подставляя в эти соотношения (12, 16)—(12, 18), получаем систему уравнений относительно $B_1$, $A_2$, $B_2$ и $A_3$:

$$\left.\begin{aligned} 1+B_1&=A_2+B_2, & A_2e^{ik'a}+B_2e^{-ik'a}&=A_3e^{ika},\\ k(1-B_1)&=k'(A_2-B_2), & A_2e^{ik'a}-B_2e^{-ik'a}&=\frac{k}{k'}A_3e^{ika}. \end{aligned}\right\} \qquad (12,20)$$

Рассмотрим сразу наиболее интересный случай $E < U_0$. Если бы движение частиц происходило по законам классической механики, то барьер был бы для них полностью непрозрачным и в точке $x = 0$ частицы испытывали бы полное отражение от потенциального барьера. Иначе дело обстоит в случае микрочастиц, движение которых описывается законами квантовой механики.

Разрешая систему (12, 20) относительно $A_3$ и учитывая, что $k' = i\varkappa$, где $\varkappa$ определена в (12, 10), получаем

$$A_3=\frac{4ik\varkappa e^{-ika}}{(k+i\varkappa)^2e^{\varkappa a}-(k-i\varkappa)^2e^{-\varkappa a}}. \qquad (12,21)$$

Амплитуда плоской волны оказывается отличной от нуля в области за барьером, хотя энергия частицы меньше высоты барьера $E < U_0$. Это означает, что микрочастица с известной вероятностью может пройти через потенциальный барьер путем туннельного перехода. Туннельное прохождение частиц, первоначально казавшееся парадоксальным эффектом, в настоящее время не только обнаружено на опыте, но играет фундаментальную роль в ряде областей физики, в частности, в ядерной физике. Достаточно сказать, что с туннельным прохождением через барьер связаны $\alpha$-распад радиоактивных ядер, явление самопроизвольного деления ядер урана и т. п. Туннельным переходом обусловлено явление холодной эмиссии электронов из металлов в сильном электрическом поле и ряд других процессов.

Определим коэффициент прохождения $D$ микрочастиц через барьер:

$$D=\frac{j_D}{j_0}=|A_3|^2=\frac{4k^2\varkappa^2}{(k^2+\varkappa^2)^2\,\mathrm{sh}^2\,\varkappa a+4k^2\varkappa^2}. \qquad (12,22)$$

Если $\varkappa a \gg 1$, то $\operatorname{sh}\varkappa a \approx \frac{1}{2}e^{\varkappa a}$, и выражение (12,22) упрощается:

$$D \simeq \frac{16k^2\varkappa^2}{(k^2+\varkappa^2)^2}\, e^{-2\varkappa a}. \tag{12,23}$$

Основная зависимость коэффициента прохождения от ширины и высоты барьера определяется экспоненциальным множителем. Обозначая предэкспоненциальный множитель через $D_0$, имеем

$$D = D_0 e^{-\frac{2}{\hbar} a\sqrt{2m(U_0-E)}}. \tag{12,24}$$

Мы видим, что вероятность прохождения через барьер не слишком мала, если

$$\frac{2}{\hbar}\sqrt{2m(U_0-E)}\, a \lesssim 1. \tag{12,25}$$

Условие (12,25) может, очевидно, выполняться только в области микроявлений. Так, если мы подставим в (12,25) величины ядерных масштабов $a \sim 10^{-13}$ *см*, $m \sim 10^{-24}$ *г* (масса нуклона), $U_0 - E \sim 10$ *Мэв* ($10^{-5}$ *эрг*), то, произведя оценку, находим, что $D \sim e^{-1}$. Таким образом, частица может с заметной вероятностью пройти через барьер, высота которого превышает ее энергию на 5—10 *Мэв*. Совершенно иной результат получится для той же частицы и той же высоты барьера, если его пространственная протяженность будет составлять $a \sim 1$ *см*. Тогда $D \sim 10^{-13}$. Это означает, что в области макроскопических явлений эффект туннельного перехода практически полностью отсутствует. Вероятность туннельного прохождения через барьеры произвольной формы мы рассмотрим в § 42.

## § 13. Одномерное движение [1])

В этой главе был рассмотрен ряд простых задач квантовой механики, относящихся к одномерному движению. Рассмотренные трехмерные задачи также сводятся к одномерным, потому что уравнение Шредингера с потенциалом

$$U(x, y, z) = U_1(x) + U_2(y) + U_3(z)$$

сводится к одномерным уравнениям с потенциалами $U_1$, $U_2$ и $U_3$ соответственно. Полученные результаты позволяют сделать некоторые общие выводы о свойствах одномерного движения частиц.

---

[1]) См. подробнее Л. Д. Ландау и Е. М. Лифшиц, Квантовая механика, Физматгиз, 1963, стр. 83.

При одномерном движении уровни энергии могут принадлежать как к дискретному (см. § 8—11), так и к сплошному спектру (§ 12). Состояниям дискретного спектра, как мы видели, отвечают квадратично интегрируемые волновые функции, т. е. волновые функции, для которых условие нормировки может быть написано в виде

$$\int |\psi_n(x)|^2 dx = 1.$$

Это условие означает, что движение финитно, т. е. вероятность обнаружить частицу на сколь угодно больших расстояниях исчезающе мала.

Наоборот, если частица может уходить на сколь угодно большие расстояния, т. е. движение инфинитно, ее волновая функция квадратично не интегрируема. Можно показать, что в этом случае энергия принадлежит сплошному спектру. Предположим, что потенциальная энергия частицы $U(x)$ как-то меняется от ее значения при $x \to \infty$, $U(\infty)$, которое мы выберем за начало отсчета энергии, до значения $U(-\infty) = U_0$ при $x \to \infty$. Будем считать, для определенности, $U_0$ положительным, $U_0 > 0$. Функция $U(x)$ может меняться совершенно произвольно. Предположим лишь, что она имеет минимум $U_{\min} < 0$. Тогда при энергии $U_{\min} < E < 0$ частица не может уйти на бесконечность. При этих значениях энергии движение финитно, а спектр дискретен. Уровни энергии дискретного спектра не вырождены. Последнее утверждение легко доказывается от противного. Действительно, если предположить, что $\psi_1$ и $\psi_2$ — два решения уравнения Шредингера, отвечающее одному и тому же значению энергии $E$, то они удовлетворяют соотношению

$$\frac{1}{\psi_1}\frac{d^2\psi_1}{dx^2} = \frac{2m}{\hbar^2}(U - E) = \frac{1}{\psi_2}\frac{d^2\psi_2}{dx^2},$$

т. е.

$$\frac{1}{\psi_1}\frac{d^2\psi_1}{dx^2} = \frac{1}{\psi_2}\frac{d^2\psi_2}{dx^2}.$$

Интегрируя это соотношение по $x$, получаем

$$\psi_2\frac{d\psi_1}{dx} - \psi_1\frac{d\psi_2}{dx} = \text{const}. \qquad (13,1)$$

Но на бесконечности $\psi_1 = \psi_2 = 0$. Поэтому постоянная в правой части соотношения (13,1) равна нулю, следовательно,

$$\psi_2\frac{d\psi_1}{dx} = \psi_1\frac{d\psi_2}{dx}.$$

Интегрируя еще раз по $x$, получаем $\psi_2 = \text{const}\cdot\psi_1$. Это означает, что обе функции описывают одно и то же состояние, т. е. вырождение отсутствует.

В области

$$0<E<U_0$$

частица может распространяться в сторону положительных $x$ как угодно далеко. Поэтому движение инфинитно, а энергетический спектр — сплошной. Волновые функции при этом также не вырождены. Действительно, предыдущее доказательство справедливо и в этом случае, так как волновые функции обращаются в нуль при $x\to-\infty$. Асимптотические выражения для волновых функций при $x\to\pm\infty$ легко получить из уравнения Шредингера

$$\frac{d^2\psi}{dx^2}+\frac{2m}{\hbar^2}(E-U(x))\,\psi=0,$$

если подставить туда $U=0$ при $x\to\infty$ и $U=U_0$ при $x\to-\infty$. Соответственно получаем

$$\psi(x)=A\sin(kx+\alpha) \quad \text{при} \quad x\to\infty, \tag{13,2}$$

и

$$\psi(x)=Be^{\varkappa x} \quad \text{при} \quad x\to-\infty, \tag{13,3}$$

где

$$k=\frac{1}{\hbar}\sqrt{2mE} \quad \text{и} \quad \varkappa=\frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(U_0-E)}.$$

т. е. решение имеет вид стоячей плоской волны при $x\to\infty$ и экспоненциально затухает при $x\to-\infty$.

В энергетической области

$$E>U_0$$

движение инфинитно в обе стороны. Энергетический спектр — сплошной. Так как уравнение Шредингера — второго порядка, оно имеет два линейно независимых решения. В этой области энергий оба эти решения удовлетворяют необходимым требованиям. Поэтому уровни энергии — двукратно вырождены. Асимптотическое выражение для волновой функции имеет вид

$$\psi=A_1e^{ikx}+A_2e^{-ikx}, \tag{13,4}$$

где одно слагаемое соответствует частице, движущейся в положительном направлении оси $x$, а второе — частице, движущейся в отрицательном направлении оси $x$.

Предположим теперь, что поле неограниченно возрастает, т. е. $|U(x)|\to\infty$ при $x\to\pm\infty$. В качестве простейшего и в то же время важного примера рассмотрим задачу о движении частицы в однородном внешнем поле

$$U(x)=-f\cdot x.$$

Ось $x$ мы выбрали в направлении поля. Через $f$ обозначена сила, действующая на частицу $f=-\frac{dU}{dx}$. Потенциальную

энергию мы отсчитываем от ее значения при $x = 0$, поэтому $U(0) = 0$. Уравнение Шредингера для движения в таком поле имеет вид

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E + fx)\psi = 0. \tag{13,5}$$

Введем вместо $x$ новую переменную:

$$\eta = \left(\frac{2mf}{\hbar^2}\right)^{1/3}\left(x + \frac{E}{f}\right).$$

Соответственно уравнение (13,5) будет иметь вид

$$\frac{d^2\psi}{d\eta^2} + \eta\psi = 0. \tag{13,6}$$

Решение уравнения (13,6) может быть выражено через функцию Бесселя

$$\psi(\eta) = \sqrt{\eta}\, Z_{1/3}\left(\frac{2}{3}\eta^{3/2}\right).$$

Более удобным является выражение решения (13,6) через так называемую функцию Эйри. Именно, решение уравнения (13,6), конечное при всех значениях $\eta$, имеет вид

$$\psi(\eta) = C\Phi(\eta), \tag{13,7}$$

где через $\Phi(\eta)$ обозначена функция Эйри

$$\Phi(\eta) = \frac{1}{\sqrt{\pi}}\int_0^\infty \cos\left(\frac{u^3}{3} + u\eta\right) du, \tag{13,8}$$

а $C$ — нормировочная постоянная.

Таким образом, уравнение Шредингера (13,5) имеет решение, удовлетворяющее необходимым требованиям при любом значении энергии $E$. Следовательно, при движении в однородном поле энергетический спектр частицы является сплошным, что соответствует инфинитному движению. В данном случае $U \to -\infty$ при $x \to \infty$, т. е. неограниченным является движение в положительном направлении оси $x$.

Волновая функция (13,7) имеет достаточно простой вид при $\eta \to \pm\infty$. Пользуясь известными асимптотическими выражениями для функции Эйри (см. сноску, стр. 59), имеем

$$\psi(\eta) = \frac{C}{2|\eta|^{1/4}} e^{-\frac{2}{3}|\eta|^{3/2}} \quad \text{при} \quad \eta \to -\infty, \tag{13,9}$$

и

$$\psi(\eta) = \frac{C}{\eta^{1/4}} \sin\left(\frac{2}{3}\eta^{3/2} + \frac{\pi}{4}\right) \quad \text{при} \quad \eta \to \infty. \tag{13,10}$$

Постоянная $C$ определяется из условия нормировки. Интеграл от квадрата модуля волновой функции (13,7) по всему пространству, конечно, расходится, что соответствует инфинитному движению. Правила нормировки в подобных случаях мы обсудим в § 18.

## § 14. Уравнение Шредингера для системы частиц

В предыдущих параграфах мы рассмотрели законы движения одной частицы во внешнем поле. Однако круг рассмотренных задач был весьма ограничен. В самом деле, уже простейшая система — атом водорода — представляет собой, строго говоря, систему из двух частиц. Тем более это относится к таким системам, как многоэлектронные атомы, молекулы, ядра атомов, твердое тело и т. д. Обобщая результаты, полученные в § 6, сформулируем основное уравнение квантовой механики — уравнение Шредингера для системы $N$ частиц. Оно имеет вид:

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=\sum_{i=1}^{N}\left(-\frac{\hbar^2}{2m_i}\right)\Delta_i\psi+\sum_{i=1}^{N}U_i(\boldsymbol{r}_i)\psi+U_{\text{вз}}(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2,\ldots,\boldsymbol{r}_N)\psi. \quad (14,1)$$

Здесь лапласиан $\Delta_i$

$$\Delta_i=\frac{\partial^2}{\partial x_i^2}+\frac{\partial^2}{\partial y_i^2}+\frac{\partial^2}{\partial z_i^2}$$

действует на координаты $i$-й частицы. $U_i(\boldsymbol{r}_i)$ — потенциальная энергия $i$-й частицы во внешнем поле. $U_{\text{вз}}$ — потенциальная энергия взаимодействия частиц между собой, $m_i$ — масса $i$-й частицы. Суммирование проводится по всем частицам системы. Волновая функция, описывающая систему частиц, в соответствии с § 2 зависит от координат всех частиц и времени $\psi(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2,\ldots,\boldsymbol{r}_N,t)$.

Уравнение Шредингера для стационарных состояний имеет вид

$$\sum_{i=1}^{N}\left(-\frac{\hbar^2}{2m_i}\right)\Delta_i\psi+\sum_{i=1}^{N}U_i(\boldsymbol{r}_i)\psi+U_{\text{вз}}(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2,\ldots,\boldsymbol{r}_N)\psi=E\psi. \quad (14,2)$$

В качестве простейшего примера интегрирования уравнения (14,2) рассмотрим систему невзаимодействующих друг с другом частиц, т. е. будем предполагать, что энергия взаимодействия равна нулю $U_{\text{вз}}=0$. В этом случае уравнение Шредингера можно переписать в виде

$$\sum_{i=1}^{N}\left(-\frac{\hbar^2}{2m_i}\Delta_i+U_i(\boldsymbol{r}_i)\right)\psi=E\psi, \quad (14,3)$$

где члены в каждой скобке зависят только от координат соответствующей частицы. Будем искать волновую функцию $\psi$ в виде произведения функций, зависящих от координат отдельных частиц,

$$\psi = \psi_1(\boldsymbol{r}_1)\,\psi_2(\boldsymbol{r}_2)\,\ldots\,\psi_N(\boldsymbol{r}_N). \qquad (14,4)$$

После подстановки в уравнение Шредингера получаем

$$\sum_{i=1}^{N} \psi_1(\boldsymbol{r}_1)\,\ldots\,\psi_{i-1}(\boldsymbol{r}_{i-1})\,\psi_{i+1}(\boldsymbol{r}_{i+1})\,\ldots$$
$$\ldots\,\psi_N(\boldsymbol{r}_N)\left(-\frac{\hbar^2}{2m_i}\Delta_i + U_i(\boldsymbol{r}_i)\right)\psi_i(\boldsymbol{r}_i) = E\psi.$$

Разделив правую и левую части на функцию $\psi$, найдем

$$\sum_{i=1}^{N} \frac{1}{\psi_i(\boldsymbol{r}_i)}\left(-\frac{\hbar^2}{2m_i}\Delta_i + U_i(\boldsymbol{r}_i)\right)\psi_i(\boldsymbol{r}_i) = E.$$

В правой части уравнения стоит постоянная величина. Левая часть составлена из суммы членов, каждый из которых есть функция своей независимой переменной. Для того чтобы равенство имело место при всех значениях независимых переменных, необходимо, чтобы выполнялись условия

$$-\frac{\hbar^2}{2m_i}\Delta_i\psi_i(\boldsymbol{r}_i) + U_i(\boldsymbol{r}_i)\,\psi_i(\boldsymbol{r}_i) = E_i\psi_i(\boldsymbol{r}_i), \qquad \sum_{i=1}^{N} E_i = E,$$

где $E_i$ — постоянные величины, которые, как легко видеть, представляют энергии отдельных частиц.

Таким образом, если левая часть уравнения Шредингера может быть представлена в виде суммы (14,3), то волновая функция системы распадается на произведение волновых функций, а энергия системы является суммой энергий отдельных частиц.

Полученные результаты имеют простой физический смысл. Мы предполагали, что энергия взаимодействия между частицами равна нулю. Естественно поэтому, что полная энергия всей системы складывается из суммы энергий отдельных частиц, движение же каждой частицы происходит независимо от движения других частиц. Вероятность обнаружения координат частиц записывается в виде

$$dW(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2, \ldots, \boldsymbol{r}_N) = |\psi_1(\boldsymbol{r}_1)|^2\,|\psi_2(\boldsymbol{r}_1)|^2\,\ldots\,|\psi_N(\boldsymbol{r}_N)|^2\,dV_1\,\ldots\,dV_N.$$

Последний результат находится в полном согласии с теоремой умножения вероятностей независимых событий.

Рассмотрим далее более подробно систему из двух частиц с массами $m_1$ и $m_2$. Будем предполагать, что потенциальная энер-

гия взаимодействия зависит только от расстояния между частицами, а внешнее поле отсутствует. Уравнение Шредингера для стационарных состояний в этом случае имеет вид

$$-\frac{\hbar^2}{2m_1}\Delta_1\psi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2) - \frac{\hbar^2}{2m_2}\Delta_2\psi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2) + U(|\boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_2|)\psi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2) = E\psi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2). \quad (14,5)$$

Преобразуем это уравнение, введя новые координаты $\boldsymbol{R}$ и $\boldsymbol{r}$, определяемые соотношением

$$\left.\begin{aligned} \boldsymbol{R} &= \frac{m_1\boldsymbol{r}_1 + m_2\boldsymbol{r}_2}{m_1 + m_2}, \\ \boldsymbol{r} &= \boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_2. \end{aligned}\right\} \quad (14,6)$$

Заметим, что новые переменные совершенно аналогичны координатам центра тяжести и относительного движения в классической механике. В результате несложных, но несколько длинных преобразований уравнение Шредингера преобразуется к виду

$$-\frac{\hbar^2}{2M}\Delta_R\psi - \frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta_r\psi + U(r)\psi = E\psi. \quad (14,7)$$

Здесь $M$ и $\mu$ — полная и приведенная массы системы

$$\left.\begin{aligned} M &= m_1 + m_2, \\ \mu &= \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}. \end{aligned}\right\} \quad (14,8)$$

Мы видим, что левая часть уравнения Шредингера опять распадается на сумму двух слагаемых и имеет вид, аналогичный уравнению (14,3). В этом случае решение уравнения Шредингера можно представить в виде

$$\psi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2) = \varphi(\boldsymbol{R})\psi_0(\boldsymbol{r}). \quad (14,9)$$

Подставляя (14,9) в (14,7) и повторяя преобразования, проведенные ранее, получаем

$$-\frac{\hbar^2}{2M}\Delta_R\varphi = E_R\varphi, \quad (14,10)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta_r\psi_0 + U(\boldsymbol{r})\psi_0 = E_r\psi_0, \quad (14,11)$$

$$E_R + E_r = E. \quad (14,12)$$

Уравнение (14,10) является уравнением Шредингера для свободной частицы с массой $M$. Его решением служит функция

$$\varphi(\boldsymbol{R}) = Ae^{\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{P}\boldsymbol{R}}, \quad (14,13)$$

где через $\boldsymbol{P}$ обозначен полный импульс системы.

Величина $E_R$ равна

$$E_R = \frac{P^2}{2M}$$

и является кинетической энергией движения системы как целого.

Таким образом, в соответствии с (14,9) и (14,13) решение уравнения Шредингера может быть представлено в виде

$$\psi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2) = Ae^{\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{PR}}\psi_0(\boldsymbol{r}). \qquad (14,14)$$

Из полученных формул видно, что центр тяжести системы движется в пространстве как свободная частица, а относительное движение частиц совершается независимо от движения центра тяжести и описывается функцией $\psi_0$, удовлетворяющей уравнению (14,11). Полная энергия системы складывается из энергий относительного движения и движения центра тяжести. Мы видим, следовательно, что в квантовой механике, как и в классической физике, задача движения двух частиц, потенциальная энергия взаимодействия $U$ которых зависит только от расстояния между ними $U(|\boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_2|)$, сводится к задаче движения одной частицы с приведенной массой $\mu$ во внешнем поле $U$.

ГЛАВА III

# МАТЕМАТИЧЕСКИЙ АППАРАТ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

## § 15. Линейные операторы

Выше мы видели, что при решении уравнения Шредингера можно найти волновые функции и энергию системы. Последняя в некоторых случаях (частица в потенциальной яме) имеет дискретный, в других (свободная частица; частица, проходящая через барьер) непрерывный ряд значений.

Зная волновую функцию $\psi$, мы могли найти вероятность нахождения частицы в данной точке пространства, а также средние значения величин, зависящих от координат. При этом, как это было показано в § 4, координаты и соответствующие проекции импульса частицы одновременно не имеют определенных значений. Однако использованный нами расчетный аппарат был недостаточен для ответа на ряд важных вопросов. В виде примера приведем некоторые из них. Какие именно величины не могут иметь одновременно определенные значения? Как найти среднее значение величин, которые не являются функциями координат? Какие характеристики квантовомеханической системы должны быть заданы для того, чтобы ее состояние было полностью определено?

Своеобразие задач квантовой механики потребовало развития и применения специального математического аппарата.

Математический аппарат квантовой механики должен соответствовать физической постановке задач квантовой механики. Оказалось, что в математике был уже разработан соответствующий математический аппарат — теория линейных операторов. Мы рассмотрим сперва основы этой теории, а в дальнейшем покажем, как аппарат теории линейных операторов может быть связан с задачами квантовой механики.

Под оператором будем понимать рецепт или правило, по которому одной функции $\varphi(x_1, x_2, x_3, \ldots)$ переменных $x_1, x_2, x_3, \ldots$ сопоставляется другая функция $\chi(x_1, x_2, x_3, \ldots)$ тех же переменных.

В дальнейшем операторы мы будем обозначать при помощи букв со шляпкой, например $\hat{F}$. С помощью символа $\hat{F}$ правило перехода от функции $\varphi$ и функции $\chi$ можно записать в виде

$$\chi = \hat{F}\varphi. \tag{15,1}$$

Рассмотрим несколько простейших операторов.

Оператор $\hat{F}$ может, например, означать дифференцирование по какой-либо переменной

$$\chi(x_1, x_2, \ldots) = \frac{\partial}{\partial x_i}\varphi(x_1, x_2, \ldots).$$

Символически этот оператор записывается как

$$\hat{F} = \frac{\partial}{\partial x_i}.$$

Операторы дифференцирования будут встречаться особенно часто. Поэтому мы введем для них специальное наименование дифференциальных операторов. Оператор $\hat{F}$ может также означать умножение на какую-либо величину, возведение в степень и т. д.

Оператор независимой переменной $\hat{x}$ определим как умножение на эту переменную

$$\chi = x\varphi.$$

В операторном виде может быть представлено также и интегральное соотношение между функциями $\varphi$ и $\chi$:

$$\chi(x) = \int K(x, \xi)\varphi(\xi)\,d\xi = \hat{F}\varphi. \tag{15,2}$$

Функция $K(x, \xi)$ носит название ядра интегрального оператора $\hat{F}$.

Подчеркнем, что мы и раньше пользовались дифференциальными операторами — оператором $\nabla = \boldsymbol{i}\frac{\partial}{\partial x} + \boldsymbol{j}\frac{\partial}{\partial y} + \boldsymbol{k}\frac{\partial}{\partial z}$, оператором Лапласа $\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$ и другими.

Определим теперь линейный оператор $\hat{F}$ как такой оператор, для которого выполнены равенства

$$\hat{F}(\varphi_1 + \varphi_2) = \hat{F}\varphi_1 + \hat{F}\varphi_2, \tag{15,3}$$

$$\hat{F}C\varphi = C\hat{F}\varphi, \tag{15,4}$$

где $C$ — произвольная постоянная. Отсюда следует, что

$$\hat{F}(C_1\varphi_1 + C_2\varphi_2) = C_1\hat{F}\varphi_1 + C_2\hat{F}\varphi_2, \tag{15,5}$$

где $C_1$, $C_2$ — произвольные постоянные. Очевидно, что перечисленные выше операторы являлись линейными операторами.

В квантовой механике по причинам, ясным из дальнейшего, мы будем иметь дело исключительно с линейными операторами. Все дальнейшее будет относиться только к линейным операторам.

Комбинируя два заданных оператора $\hat{F}$ и $\hat{R}$, можно определить их сумму и произведение. Под суммой операторов $\hat{F}$ и $\hat{R}$ мы будем понимать оператор $\hat{G}$, определенный соотношением

$$\left.\begin{aligned} \hat{G} &= \hat{F} + \hat{R}, \\ \hat{G}\varphi &= \hat{F}\varphi + \hat{R}\varphi. \end{aligned}\right\} \tag{15,6}$$

Под произведением двух операторов $\hat{F}$ и $\hat{R}$ будем понимать оператор $\hat{L} = \hat{F}\hat{R}$, заключающийся в последовательном применении операторов $\hat{R}$ и $\hat{F}$

$$\hat{L}\varphi = \hat{F}(\hat{R}\varphi). \tag{15,7}$$

Если же сначала применяется оператор $\hat{F}$, а затем оператор $\hat{R}$, то их произведением будет оператор $\hat{L}' = \hat{R}\hat{F}$

$$\hat{L}'\varphi = \hat{R}(\hat{F}\varphi). \tag{15,8}$$

Заметим, что операторы $\hat{L}$ и $\hat{L}'$, вообще говоря, не совпадают между собой, т. е. произведение операторов существенно зависит от порядка сомножителей. В соответствии с этим алгебра операторов — это алгебра некоммутирующих величин. Два оператора называются коммутирующими между собой, сели произведение операторов не зависит от порядка сомножителей, и некоммутирующими в обратном случае. В качестве примера найдем произведение оператора дифференцирования по $x$ на оператор умножения на $x$ при обоих порядках сомножителей, т. е. положим

$$\hat{F} = x,$$
$$\hat{R} = \frac{d}{dx}.$$

Оператор произведения $\hat{L}$ будет равен в соответствии с (15,7)

$$\hat{L} = x\frac{\partial}{\partial x}.$$

Найдем теперь оператор $\hat{L}' = \hat{R}\hat{F}$:

$$\hat{L}'\psi = \frac{\partial}{\partial x}(x\psi) = \left(1 + x\frac{\partial}{\partial x}\right)\psi.$$

Мы видим, следовательно, что в этом случае оператор $L'$ равен

$$\hat{L}' = 1 + x\frac{\partial}{\partial x}$$

и не совпадает с оператором $\hat{L}$. Таким образом, операторы $\hat{L}$ и $\hat{L}'$ не коммутируют. Используя полученные выражения для операторов $\hat{L}$ и $\hat{L}'$, мы можем написать

$$\frac{\partial}{\partial x}x - x\frac{\partial}{\partial x} = 1.$$

Стоящую в этом операторном соотношении единицу естественно назвать единичным оператором. Если бы в качестве оператора $\hat{F}$ мы взяли оператор умножения на какую-либо другую независимую переменную, скажем на $y$, то оказалось бы, что операторы $\frac{\partial}{\partial x}$ и $y$ коммутируют

$$y\frac{\partial}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x}y = 0. \qquad (15,9)$$

Для некоторых операторов оказывается выполненным соотношение

$$\hat{F}\hat{R} = -\hat{R}\hat{F}. \qquad (15,10)$$

В этом случае операторы $\hat{F}$ и $\hat{R}$ называются антикоммутирующими. Оператор, равный $\hat{F}\hat{R}—\hat{R}\hat{F}$, мы будем называть коммутатором операторов $\hat{F}$ и $\hat{R}$ и обозначать при помощи волнистых скобок, т. е.

$$\hat{F}\hat{R} - \hat{R}\hat{F} = \{\hat{F},\ \hat{R}\} \qquad (15,11)$$

Данному оператору $\hat{F}$ можно сопоставить обратный оператор $\hat{F}^{-1}$. Обратный оператор определяется соотношениями

$$\hat{F}^{-1}\hat{F}\psi = \psi, \quad \hat{F}\hat{F}^{-1}\psi = \psi$$

или

$$\hat{F}\hat{F}^{-1} = \hat{F}^{-1}\hat{F} = 1. \qquad (15,12)$$

Если $\hat{F}$ — некоторый дифференциальный оператор, то оператор $\hat{F}^{-1}$, обратный к данному, имеет вид интегрального оператора. Действительно, предположим, что имеет место соотношение

$$\hat{F}\psi(x) = \varphi(x). \qquad (15,13)$$

Тогда, действуя на правую и левую части этого равенства оператором $\hat{F}^{-1}$, получим

$$\psi(x) = \hat{F}^{-1}\varphi(x). \qquad (15,14)$$

С другой стороны, соотношение (15,14) можно написать в виде

$$\psi(x) = \int G(x, x')\,\varphi(x')\,dx', \tag{15,15}$$

где функция $G(x, x')$, называемая функцией Грина уравнения (15,13), удовлетворяет соотношению

$$\hat{F}G(x, x') = \delta(x - x'). \tag{15,16}$$

Действительно, если мы подействуем на правую и левую части равенства (15,15) оператором $\hat{F}$, то при условии (15,16) мы опять придем к соотношению (15,13). Сравнивая (15,14) и (15,15), мы видим, что функция Грина $G(x, x')$ является ядром интегрального оператора $\hat{F}^{-1}$. Из уравнения (15,16) функция Грина $G(x, x')$ определяется неоднозначно. Для однозначного определения нужно задать еще некоторые условия типа граничных условий.

Соотношение (15,13) можно рассматривать как некоторое уравнение относительно функции $\psi(x)$ с заданной функцией $\varphi(x)$, решение которого дается формулой (15,15). Следует только иметь в виду, что для получения общего решения мы должны добавить к (15,15) общее решение $\psi_0(x)$ однородного уравнения

$$\hat{F}\psi_0(x) = 0.$$

Тогда имеем

$$\psi(x) = \psi_0(x) + \int G(x, x')\,\varphi(x')\,dx'. \tag{15,17}$$

Найденное соотношение понадобится нам в дальнейшем.

## § 16. Собственные значения и собственные функции операторов

Рассмотрим операторное соотношение

$$\hat{F}\psi = F\psi. \tag{16,1}$$

Соотношение (16,1) означает, что при применении оператора $\hat{F}$ к функции $\psi$ снова получается функция $\psi$, умноженная на некоторую постоянную $F$. Совершенно очевидно, что при данном виде оператора $\hat{F}$ соотношению (16,1) может удовлетворять отнюдь не всякая функция $\psi$. Иными словами, соотношение (16,1) является уравнением. Вид функции $\psi$ может быть получен путем решения уравнения (16,1). Если оператор $\hat{F}$ является линейным дифференциальным оператором, то уравнение (16,1) будет дифференциальным уравнением. Поскольку из вида уравнения

сразу ясно, что $\psi = 0$ является его тривиальным решением, (16,1) представляет линейное однородное дифференциальное уравнение. Исследование таких линейных однородных уравнений является важнейшей задачей теории операторов.

В дальнейшем нас будут интересовать не любые операторы $\hat{F}$ и функции $\psi$, а лишь функции, удовлетворяющие определенным условиям:

1) функция $\psi$ должна существовать во всей области изменения независимых переменных. Например, в случае декартовых координат, в области $-\infty < x < \infty$, $-\infty < y < \infty$, $-\infty < z < \infty$;

2) в области существования функция $\psi$ должна быть конечной и непрерывной, вместе со своей первой производной; за исключением, может быть, особых точек;

3) функция $\psi$ должна быть однозначна.

Совокупность условий 1)—3) мы будем именовать стандартными условиями. Оказывается, что уравнение (16,1), вообще говоря, имеет решения, отличные от тривиального и удовлетворяющие стандартным условиям не при всех значениях параметра $F$, а лишь при некоторых избранных его значениях. Избранные значения $F$, при которых существуют нетривиальные решения уравнения (16,1), именуются собственными значениями оператора $\hat{F}$, а соответствующие им решения уравнения (16,1) — собственными функциями оператора $\hat{F}$.

Приведем прежде всего знакомые уже нам задачи о собственных функциях и собственных значениях.

1) При рассмотрении задачи о движении частицы в потенциальной яме мы решали уравнение (16,1) с дифференциальным оператором $\hat{F} = -\frac{d^2}{dx^2}$. Граничные условия приводили к собственным числам (8,5) и собственным функциям (8,7) оператора $\hat{F}$.

2) Если при том же виде оператора мы не требуем обращения $\psi$ в нуль на границах промежутка $(0, l)$, то решения (8,2) будут иметь вид

$$\psi = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}.$$

Если $k^2 > 0$, то при всех значениях $x$ функция $\psi$ конечна, так что решение удовлетворяет стандартным условиям. При отрицательных $k^2$

$$\psi = Ae^{-\varkappa x} + Be^{\varkappa x}, \qquad \text{где} \qquad k = i\varkappa,$$

решений, удовлетворяющих стандартным условиям, не существует.

3) В задаче об осцилляторе мы рассматривали решение уравнения (16,1) для оператора (см. (10,3))

$$\hat{F} = -\frac{d^2}{dx^2} + x^2.$$

Задача имела решения при $F = \frac{2E}{\hbar\omega} = 2n + 1$.

Из приведенных примеров ясно, что совокупность собственных значений оператора, которую мы будем именовать его спектром, может быть как дискретной (пример 1 и 3), так и непрерывной (пример 2). В первом случае мы будем именовать спектр дискретным, во втором — непрерывным или сплошным. Можно доказать, что собственные функции, отвечающие дискретному спектру собственных значений, — квадратично интегрируемы, т. е. интеграл $\int |\psi|^2 dV$ сходится. Собственные функции, отвечающие сплошному спектру собственных значений, — квадратично неинтегрируемы. Если каждому собственному значению оператора принадлежит одна и только одна собственная функция $\psi$, спектр носит название невырожденного. Если, напротив, одному собственному значению $F$ отвечает несколько, например $s$ различных собственных функций, то данное собственное значение называют вырожденным с кратностью вырождения $s$.

Приведенные примеры важны в том отношении, что они проясняют наш интерес к теории операторов. Задача о нахождении решения уравнения Шредингера представляет частный случай задачи о собственных функциях операторов определенного вида.

Прежде чем от этого эвристического рассуждения перейти к установлению более полной связи между понятиями квантовой механики и теорией линейных операторов, необходимо еще рассмотреть некоторые важные свойства операторов определенного класса.

## § 17. Эрмитовы операторы

Собственные значения $F$ в операторном уравнении (16,1) могут быть, вообще говоря, комплексными. Нас, однако, будут интересовать лишь такие уравнения, которые приводят только к вещественным собственным значениям. Оказывается, что существует класс операторов, которые могут обладать только вещественными собственными значениями. Такие операторы носят название эрмитовых или самосопряженных. Каждому линейному оператору $\hat{F}$ можно сопоставить некоторый другой оператор $\hat{F}^+$, который мы будем называть оператором, сопряженным к данному, или эрмитово сопряженным. Сопряженный оператор

определяется условием

$$\int \psi_1^* \hat{F} \psi_2 \, dV = \int \psi_2 \left(\hat{F}^+ \psi_1\right)^* dV. \tag{17,1}$$

Здесь, как всегда, звездочкой обозначены комплексно сопряженные величины. Интегрирование в (17,1) ведется по всей области изменения независимых переменных. Через $dV$ мы обозначили элемент объема этой области.

Функции $\psi_1$, $\psi_2$ должны удовлетворять необходимым требованиям для сходимости интегралов в (17,1). Кроме того, они должны удовлетворять некоторым граничным условиям, которые обычно сводятся к требованию, чтобы функции $\psi_1$ и $\psi_2$ обращались в нуль на бесконечности. В остальном же функции $\psi_1$ и $\psi_2$ достаточно произвольны. Если оператор $\hat{F}$ совпадает со своим сопряженным оператором $F^+ = \hat{F}$, то такой оператор называют эрмитовым или самосопряженным.

Соотношение (17,1) в этом случае имеет вид

$$\int \psi_1^* \hat{F} \psi_2 \, dV = \int \psi_2 \hat{F}^* \psi_1^* \, dV. \tag{17,2}$$

Здесь мы через $\hat{F}^*$ обозначили оператор, определяемый соотношением

$$\hat{F}^* \psi^* = (\hat{F} \psi)^*.$$

В качестве примера найдем оператор, сопряженный к оператору дифференцирования $\hat{F} = \frac{d}{dx}$. Полагая, что функции $\psi_1$, $\psi_2$ обращаются в нуль на бесконечности, получаем, производя в (17,1) интегрирование по частям:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_1^* \frac{d}{dx} \psi_2 \, dx = - \int_{-\infty}^{\infty} \psi_2 \frac{d\psi_1^*}{dx} \, dx.$$

Сравнивая с (17,1), находим оператор $\hat{F}^+$:

$$\hat{F}^+ = - \frac{d}{dx}.$$

Мы видим, что оператор $\hat{F}^+$ в данном случае не совпадает с оператором $\hat{F}$, т. е. оператор дифференцирования не является самосопряженным. Если, однако, в качестве оператора $\hat{F}$ взять оператор $i \frac{d}{dx}$, то легко видеть, что такой оператор уже будет эрмитовым. Действительно, в этом случае имеем, интегрируя по частям:

$$i \int_{-\infty}^{\infty} \psi_1^* \frac{d}{dx} \psi_2 \, dx = - i \int_{-\infty}^{\infty} \psi_2^* \frac{d}{dx} \psi_1^* \, dx,$$

и соотношение (17,2) теперь выполняется. Отсюда следует, что оператор $\hat{F} = i\frac{d}{dx}$ эрмитов.

Определим еще оператор $\tilde{\hat{F}}$, который называется оператором, транспонированным с исходным оператором $\hat{F}$:

$$\int \psi_1^* \hat{F} \psi_2 \, dV = \int \psi_2 \tilde{\hat{F}} \psi_1^* \, dV. \tag{17,3}$$

Сравнивая (17,3) с (17,1), получаем

$$\hat{F}^+ = \tilde{\hat{F}}^*.$$

Найдем далее оператор $\hat{L}^+$, сопряженный оператору $\hat{L}$, являющемуся произведением двух операторов $\hat{L} = \hat{F}\hat{R}$. Из определения (17,1) имеем

$$\int \psi_1^* \hat{F} (\hat{R}\psi_2) \, dV = \int (\hat{R}\psi_2) (\hat{F}^+ \psi_1)^* \, dV.$$

Поменяем функции $(\hat{R}\psi_2)$ и $(\hat{F}^+\psi_1)$ местами. Тогда получим

$$\int \psi_1^* \hat{F}\hat{R} \psi_2 \, dV = \int (\hat{F}^+ \psi_1)^* \, \hat{R}\psi_2 \, dV.$$

Используем, далее, опять соотношение (17,1)

$$\int \psi_1^* \hat{F}\hat{R} \psi_2 \, dV = \int \psi_2 \left(\hat{R}^+ (\hat{F}^+ \psi_1)\right)^* dV.$$

Из этого выражения получаем оператор $\hat{L}^+ = (\hat{F}\hat{R})^+$

$$(\hat{F}\hat{R})^+ = R^+ F^+. \tag{17,4}$$

Мы видим, что оператор, сопряженный произведению, равен произведению сопряженных операторов, взятых, однако, в обратном порядке. Таким образом, если операторы $\hat{F}$ и $\hat{R}$ самосопряженные, т. е. $\hat{F}^+ = \hat{F}$, $\hat{R}^+ = \hat{R}$, то их произведение будет самосопряженным оператором только в том случае, если они коммутируют. Действительно, при этих условиях имеем

$$(\hat{F}\hat{R})^+ = \hat{R}\hat{F} = \hat{F}\hat{R}. \tag{17,5}$$

Так как каждый оператор заведомо коммутирует сам с собой, то из (17,5) следует, что если оператор $\hat{F}$ эрмитов, то эрмитовым будет и оператор $\hat{F}^2 = \hat{F}\hat{F}$, а также вообще оператор $\hat{F}^n = \underbrace{\hat{F} \cdot \hat{F} \, \ldots \, \hat{F}}_{n}$, где $n$ — целое положительное число.

Перейдем теперь к доказательству основной теоремы о вещественности собственных значений эрмитовых операторов.

Для этого перепишем еще раз уравнение (16,1), предположив для конкретности, что оператор $\hat{F}$ обладает дискретным спектром

$$\hat{F}\psi_n = F_n\psi_n.$$

Умножив уравнение слева на $\psi_n^*$ и интегрируя, получаем

$$F_n = \frac{\int \psi_n^* \hat{F}\psi_n \, dV}{\int |\psi_n|^2 \, dV}.$$

Если оператор $\hat{F}$ эрмитов, то легко видеть, что собственные значения $F_n$, определенные в (16,1), вещественны. Действительно, учитывая условия эрмитовости (17,2), находим

$$F_n^* = \frac{\int \psi_n \hat{F}\psi_n^* \, dV}{\int |\psi_n|^2 \, dV} = F_n.$$

Таким образом, мы доказали, что эрмитовы (самосопряженные) операторы имеют только действительные собственные значения.

## § 18. Ортогональность и нормировка собственных функций эрмитовых операторов

Собственные функции линейного эрмитового оператора $\hat{F}$, отвечающие различным собственным значениям $F_n$ и $F_m$, взаимно ортогональны, т. е. удовлетворяют соотношению

$$\int \psi_m^* \psi_n \, dV = 0 \qquad (\text{при } m \neq n). \tag{18,1}$$

Действительно, функции $\psi_n$ и $\psi_m^*$ удовлетворяют уравнениям (16,1)

$$\hat{F}\psi_n = F_n\psi_n, \qquad \hat{F}^*\psi_m^* = F_m\psi_m^*. \tag{18,2}$$

Поскольку оператор $\hat{F}$ эрмитов, имеем

$$\int \psi_m^* \hat{F}\psi_n \, dV = \int \psi_n \hat{F}^* \psi_m^* \, dV. \tag{18,3}$$

Используя уравнения (18,2), перепишем равенство (18,3) в виде

$$F_n \int \psi_m^* \psi_n \, dV = F_m \int \psi_m^* \psi_n \, dV.$$

Отсюда следует:

$$(F_m - F_n) \int \psi_m^* \psi_n \, dV = 0. \tag{18,4}$$

Так как по предположению $F_m \neq F_n$, то мы получаем

$$\int \psi_m^* \psi_n \, dV = 0, \tag{18,5}$$

что и доказывает наше утверждение.

Так как собственные функции удовлетворяют однородному линейному уравнению, то они определены с точностью до произвольной постоянной.

Имея в виду дальнейшее, мы будем нормировать собственные функции дискретного спектра условием

$$\int \psi_n^* \psi_n \, dV = 1. \tag{18,6}$$

Собственные функции, удовлетворяющие соотношению (18,6), мы будем именовать нормированными на единицу. Формулы (18,1) и (18,6) объединим в одну

$$\int \psi_m^* \psi_n \, dV = \delta_{nm}, \tag{18,7}$$

где $\delta_{nm}$ — символ Кронекера:

$$\delta_{nm} = \begin{cases} 1 & n = m, \\ 0 & n \neq m. \end{cases}$$

Рассмотрим теперь случай вырожденных состояний, когда одному и тому же собственному значению $F_n$ принадлежит несколько собственных функций $\psi_{n1}, \psi_{n2}, \ldots, \psi_{ns}$, где $s$ — кратность вырождения.

В качестве решения уравнения (18,2), отвечающего собственному значению $F_n$, можно взять произвольные линейные комбинации этих функций

$$\psi'_{nk} = \sum_{r=1}^{s} a_{kr} \psi_{nr}. \tag{18,8}$$

Соответствующим подбором коэффициентов $a_{kr}$ можно добиться взаимной ортогональности собственных функций $\psi'_{nk}$, принадлежащих одному и тому же собственному значению $F_n$. Накладывая также условие нормировки, получаем

$$\int \psi'^*_{nk} \psi'_{nl} \, dV = \delta_{kl}. \tag{18,9}$$

Условие (18,9) еще не определяет полностью значения коэффициентов $a_{kr}$. Действительно, если функции $\psi_{nk}$ уже ортогональны между собой и мы произвели преобразование (18,8), то ортогональность сохранится, если

$$\sum_{r=1}^{s} a_{kr}^* a_{lr} = \delta_{kl}. \tag{18,10}$$

Таким образом, в выборе коэффициентов $a_{kl}$ остается еще известный произвол.

Рассмотрим, наконец, волновые функции сплошного спектра. Для волновых функций сплошного спектра $\psi_F(x)$ условие ортогональности доказывается аналогично (18,3) — (18,5):

$$\int \psi_F^*(x)\,\psi_{F'}(x)\,dV = 0. \qquad (18,11)$$

С другой стороны, условие нормировки уже не может быть записано в виде (18,6), так как волновые функции сплошного спектра квадратично не интегрируемы. Интеграл $\int |\psi_F|^2 dV$ для них расходится. Эта расходимость связана с тем, что собственные функции сплошного спектра не обращаются в нуль на бесконечности. Собственные функции сплошного спектра удобно нормировать на $\delta$-функцию Дирака (см. приложение III), так что условия ортогональности и нормировки могут быть выражены аналогично (18,7)

$$\int \psi_F^*(x)\,\psi_{F'}(x)\,dV = \delta(F - F'). \qquad (18,12)$$

Нормировка на $\delta$-функцию, конечно, не является единственно возможной. Ниже мы встретимся и с другими способами нормировки собственных функций сплошного спектра (см., например, § 26).

## § 19. Разложение по собственным функциям

В предыдущем параграфе мы доказали, что система собственных функций произвольного линейного самосопряженного оператора является системой ортогональных функций. Оказывается, что такая система функций является полной. Произвольную непрерывную функцию, определенную в той же области изменения независимых переменных и удовлетворяющую широкому классу условий, можно разложить по этой системе собственных функций[1].

Мы приведем здесь сперва условия полноты системы собственных функций для случая оператора $F$, обладающего дискретным спектром. Напишем разложение функции $\psi$ в ряд по собственным функциям $\psi_n$, предполагая последние нормированными на единицу, в виде

$$\psi(x) = \sum_n c_n \psi_n(x). \qquad (19,1)$$

---

[1]) В. А. Смирнов, Курс высшей математики, Физматгиз, 1958, т. IV, стр. 133.

Амплитуды $c_n$ можно определить, воспользовавшись ортогональностью собственных функций. Умножая (19,1) на $\psi_m^*(x)$ и интегрируя по всей области изменения независимых переменных, получаем

$$\int \psi_m^*(x)\,\psi(x)\,dV = \sum_n c_n \int \psi_m^*(x)\,\psi_n(x)\,dV.$$

При этом мы изменили порядок суммирования и интегрирования. В силу ортогональности собственных функций (18,7), из всех членов суммы, стоящей в правой части равенства, отличен от нуля только член с $n = m$. Соответственно имеем

$$c_m = \int \psi_m^*(x)\,\psi(x)\,dV. \tag{19,2}$$

Подставляя это выражение в (19,1) и снова изменяя порядок суммирования и интегрирования, получаем

$$\psi(x) = \int \psi(x')\left(\sum_n \psi_n^*(x')\,\psi_n(x)\right)dV'. \tag{19,3}$$

Для того чтобы это выражение было справедливым для произвольной непрерывной функции $\psi(x)$, необходимо выполнение равенства

$$\sum_n \psi_n^*(x')\,\psi_n(x) = \delta(x - x'). \tag{19,4}$$

Соотношение (19,4) выражает условие полноты системы собственных функций $\psi_n(x)$. Если оператор $\hat{F}$ обладает сплошным спектром, то разложение функции $\psi(x)$ по его собственным функциям представится уже не суммой, а интегралом

$$\psi(x) = \int c(F)\,\psi_F(x)\,dF. \tag{19,5}$$

Амплитуды $c(F)$ находятся так же, как и в случае дискретного спектра. Умножая левую и правую части уравнения (19,5) на функцию $\psi_{F'}^*(x)$ и интегрируя по всей области изменения независимых переменных, находим

$$\int \psi_{F'}^*(x)\,\psi(x)\,dV = \int c(F)\,dF \int \psi_{F'}^*(x)\,\psi_F(x)\,dV.$$

Предполагая, что собственные функции $\psi_F(x)$ нормированы на $\delta$-функцию, окончательно получаем

$$c(F) = \int \psi_F^*(x)\,\psi(x)\,dV. \tag{19,6}$$

С частным случаем подобного разложения (разложения по плоским волнам) мы уже встречались в § 3. Условие полноты в случае сплошного спектра записывается аналогично (19,4)

$$\int \psi_F^*(x')\,\psi_F(x)\,dF = \delta(x - x'). \tag{19.7}$$

## § 20. Квантовомеханические величины и операторы

Мы можем теперь перейти к обсуждению основного постулата квантовой механики, устанавливающего связь между реальными физическими величинами, характеризующими свойства квантовомеханических систем, и математическим аппаратом квантовой механики.

В классической механике состояние системы определяется совокупностью координат и импульсов (или величин, выражающихся через них), входящих в уравнение движения. Все величины, характеризующие состояние системы, называют механическими величинами. В квантовой механике величины, играющие аналогичную роль будут называться квантовомеханическими величинами. Их также часто именуют физическими величинами или динамическими переменными.

На примерах, разобранных выше, были выяснены некоторые свойства квантовых систем. К ним относятся в первую очередь:

1) наличие соотношения неопределенности между значениями канонически сопряженных физических величин (таких, как, например, координата и импульс);

2) существование дискретного и непрерывного спектров значений физических величин (например, энергии квантового осциллятора и свободной частицы);

3) существование суперпозиции квантовых состояний (например, суперпозиции состояний свободной частицы);

4) непрерывный переход от понятий квантовой механики к понятиям классической механики при переходе к системам, в которых можно считать постоянную Планка бесконечно малой величиной, а квантовые числа — бесконечно большими (принцип соответствия).

Первая и вторая особенности квантовомеханических величин как раз соответствуют свойствам линейных операторов — их некоммутативности и существованию спектра собственных значений. Поэтому естественно высказать следующее основное допущение: «каждой квантовомеханической величине $F$ соответствует некоторый линейный эрмитовый оператор $\hat{F}$. Спектр собственных значений оператора $\hat{F}$ представляет спектр возможных (измеряемых) значений этой величины».

Собственная функция $\psi_F(x)$ оператора $\hat{F}$ представляет волновую функцию системы в состоянии, в котором величина, изображаемая оператором $\hat{F}$, имеет данное определенное значение $F$.

Требование эрмитовости оператора связано, очевидно, с вещественностью значений реальных физических величин, тогда как требование линейности связано с принципом суперпозиции. Совершенно ясно, что высказанное утверждение приобретет конкретный смысл лишь после того, как оно будет дополнено указанием на то, как именно может быть найден оператор, отвечающий данной квантовомеханической величине. Если бы такой рецепт был известен, то сформулированный постулат позволил бы определить спектр возможных значений этой величины. Справедливость основного постулата может быть установлена только согласием между выводами квантовой механики и опытом.

Для определения вида линейных операторов, отвечающих определенным квантовомеханическим величинам — квантовомеханических операторов, необходимо воспользоваться принципом соответствия. Именно естественно допустить, что между квантовомеханическими операторами, описывающими движение частиц в квантовой механике, имеют место те же соотношения, что и между их «оригиналами» — величинами классической механики. Так, например, оператор полной энергии $\hat{H}$ связан с операторами кинетической энергии $\hat{T}$ и потенциальной энергии $\hat{U}$ соотношением

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{U}. \tag{20,1}$$

В свою очередь оператор $\hat{T}$ равен

$$\hat{T} = \frac{\hat{p}^2}{2m}, \tag{20,2}$$

где $\hat{p}$ — оператор импульса, и т. п.

Этими соотношениями мы, в сущности, уже пользовались в предыдущей главе при получении уравнения Шредингера. Если квантовомеханические операторы связаны между собой обычными соотношениями классической механики, то достаточно получить выражение для одного оператора, чтобы построить затем полную систему операторов квантовой механики. Предельный переход к классической механике при $\hbar \to 0$ будет обеспечен автоматически, если только исходный оператор выбран правильно, с учетом этого условия. Такой подход представляется вполне правдоподобным, хотя и не строгим. В дальнейшем будет изложен другой, более последовательный метод построения операторов.

В качестве исходных операторов можно выбрать операторы координаты и импульса.

Оператор координаты $\hat{r}$, как и всякий оператор, отвечающий независимой переменной, сводится к умножению на эту переменную, т. е.

$$\hat{x} = x; \quad \hat{y} = y; \quad \hat{z} = z. \tag{20,3}$$

Для установления вида оператора импульса $\hat{p}$ можно воспользоваться тем, что свободная частица описывается уравнением Шредингера (6,5)

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi = E\psi.$$

С другой стороны, это уравнение можно в силу сказанного выше написать как

$$\frac{1}{2m}\left(\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2\right)\psi = E\psi.$$

Отсюда следует, что операторы $\hat{p}_x$, $\hat{p}_y$, $\hat{p}_z$ могут быть выбраны в виде

$$\hat{p}_x = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}; \quad \hat{p}_y = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial y}; \quad \hat{p}_z = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial z}; \quad \hat{p} = \frac{\hbar}{i}\nabla. \tag{20,4}$$

Таким образом, оператор компоненты импульса сводится к дифференцированию по соответствующей координате. Множитель $i$ обеспечивает эрмитовость оператора $\hat{p}$. Прежде чем перейти к построению операторов, отвечающих квантовомеханическим величинам, более последовательным методом, рассмотрим два принципиальных вопроса: вопрос о смысле собственных функций операторов и о возможности одновременного измерения двух квантовомеханических величин.

## § 21. Волновая функция и вероятность результатов измерений

Пусть $\hat{F}$ представляет некоторый квантовомеханический оператор, для которого можно написать:

$$\hat{F}\psi_n = F_n\psi_n.$$

Для определенности будем считать, что оператор $\hat{F}$ имеет дискретный спектр собственных значений $F_n$ и каждому из них отвечает одна собственная функция $\psi_n$ (спектр невырожденный). Поскольку собственные функции $\psi_n$ образуют полную систему функций, волновую функцию $\psi$ можно разложить в ряд

$$\psi = \sum_n c_n\psi_n. \tag{21,1}$$

На основании принципа суперпозиции мы можем заключить, что состояние системы, описываемое волновой функцией $\psi$, может быть представлено в виде суперпозиции состояний с определенными значениями $F_n$ физической величины $F$.

Амплитуда $c_m$ в разложении (21,1) показывает, с каким весом в состоянии $\psi$ представлено состояние $\psi_m$. Иными словами, амплитуда $c_m$ характеризует вероятность того, что при измерениях величины $F$, производимых над системой, находящейся в состоянии с волновой функцией $\psi$, будет обнаружено значение, равное $F_m$. В квантовой механике принимается, что указанная вероятность равна квадрату модуля амплитуды разложения $|c_m|^2$. Таким образом, если мы хотим найти вероятность того, что при измерениях, производимых над системой в состоянии $\psi$, для физической величины $F$ будет найдено значение $F_m$, следует разложить волновую функцию $\psi$ по собственным функциям оператора $\hat{F}$. Квадрат модуля соответствующей амплитуды разложения $|c_m|^2$ дает искомую вероятность. Если величина $F$ изменяется непрерывно (сплошной спектр), то можно говорить о вероятности того, что при измерении будет получено значение $F$, лежащее в интервале между $F$ и $F + dF$. Соответствующая вероятность дается выражением

$$dW = |c(F)|^2 dF. \tag{21,2}$$

Так, при разложении $\psi$ по плоским волнам (см. § 3) квадрат модуля соответствующей амплитуды разложения дает вероятность того, что при измерении получится некоторое заданное значение импульса.

Вероятности измерений заданных значений величины $F$, определенные, как это указано выше, удовлетворяют соотношениям:

$$\left.\begin{aligned} \sum_n |c_n|^2 = 1, \\ \int |c(F)|^2 dF = 1 \end{aligned}\right\} \tag{21,3}$$

(при условии, что волновая функция $\psi$ является квадратично-интегрируемой, а собственные функции оператора $\hat{F}$ нормированы условием (18,7) или (18,12)).

Докажем в виде примера последнее из этих соотношений. Пользуясь (19,5) и (19,6), получаем

$$\int c^*(F)\,c(F)\,dF = \int c^*(F)\,dF \int \psi_F^*(x)\,\psi(x)\,dV =$$

$$= \int \psi(x)\,dV \int c^*(F)\,\psi_F^*(x)\,dF = \int \psi(x)\,\psi^*(x)\,dV = 1. \tag{21,4}$$

Совокупность амплитуд $c_n$ (или $c(F)$ в случае сплошного спектра) полностью определяет волновую функцию $\psi$. Поэтому задание амплитуд разложения волновой функции по собственным функциям какого-либо оператора эквивалентно заданию самой волновой функции.

В связи с этим часто применяется следующая терминология. Волновая функция $\psi(x)$ называется волновой функцией, заданной в координатном представлении ($x$-представлении); совокупность всех амплитуд $c(F)$ называют волновой функцией в $F$-представлении. В этом смысле соотношения (19,5) и (19,6) следует считать совершенно симметричными. Соотношение (19,5) выражает разложение волновой функции $\psi$, взятой в координатном представлении, по собственным функциям $\psi_F(x)$ оператора $\hat{F}$, взятым также в $x$-представлении. Амплитуды разложения $c(F)$ представляют волновую функцию в $F$-представлении. С другой стороны, соотношение (19,6) выражает разложение волновой функции $c(F)$, взятой в $F$-представлении, по функциям $\psi_F^*(x)$, которые имеют смысл собственных функций оператора координаты, взятых в $F$-представлении (ср. (48,19)). Амплитуды разложения $\psi(x)$ представляют собой волновую функцию в $x$-представлении. Мы будем говорить также, что некоторый оператор $\hat{D}$ задан в $F$-представлении, если он воздействует на функцию, заданную в $F$-представлении, например, $\hat{D}c(F) = b(F)$. С этой точки зрения, сформулированное нами утверждение, что $|c(F)|^2dF$ равно вероятности обнаружить систему в состоянии с заданным значением $F$, становится почти очевидным. Действительно, $|\psi(x)|^2dx$ есть вероятность того, что координата частицы лежит в интервале $dx$. Ввиду равноправия $x$- и $F$-представлений $|c(F)|^2dF$ естественно трактовать как вероятность того, что измерение величины $F$ приведет к ее значению, лежащему в интервале между $F$ и $F + dF$.

## § 22. Средние значения

Предположим, что состояние системы описывается волновой функцией $\psi(x)$, которая не является собственной функцией оператора $\hat{F}$, отвечающего квантовомеханической величине $F$. Как мы уже выяснили выше, это означает, что в данном состоянии величина $F$ не имеет определенного значения. При измерениях, производимых над системой, может с известной вероятностью получиться любое собственное значение $F_n$. В связи с этим естественно попытаться найти среднее значение величины $F$ в данном состоянии. Под средним мы, как всегда, понимаем математическое ожидание (среднее арифметическое) данной величины.

Рассмотрим ансамбль, т. е. большое число совершенно одинаковых экземпляров системы. Каждая из этих систем описывается одной и той же волновой функцией $\psi$. Будем производить измерение величины $F$ в каждой из систем. Среднее значение, полученное в совокупности этих измерений, мы и будем именовать средним значением величины $F$. По общим формулам теории вероятностей (см. § 3 ч. III) мы можем написать:

$$\overline{F} = \sum_n W_n F_n, \tag{22,1}$$

где $W_n$ — вероятность получить при измерении величины $F$ собственое значение $F_n$. Используя выражения для вероятностей $W_n$, полученные нами в предыдущем параграфе, имеем для случая дискретного спектра

$$\overline{F} = \sum_n |c_n|^2 F_n \tag{22,2}$$

или, если оператор $\hat{F}$ обладает сплошным спектром,

$$\overline{F} = \int |c(F)|^2 F\, dF. \tag{22,3}$$

Эти формулы можно преобразовать так, чтобы вместо амплитуд разложения волновой функции по собственным функциям оператора $\hat{F}$ они содержали непосредственно волновую функцию $\psi(x)$ (преобразовать в координатное или любое другое представление). Для определенности предположим, что оператор $\hat{F}$ обладает дискретным спектром (в случае непрерывного спектра формулы преобразования выводятся аналогичным образом). Используя выражение для амплитуд (19,2), получаем:

$$\overline{F} = \sum_n c_n^* c_n F_n = \sum_n c_n F_n \int \psi_n(x)\, \psi^*(x)\, dV.$$

Так как собственные функции $\psi_n(x)$ удовлетворяют уравнению

$$\hat{F}\psi_n(x) = F_n \psi_n(x),$$

то последнее соотношение можно переписать в виде

$$\overline{F} = \sum_n c_n \int \psi^* \hat{F} \psi_n\, dV = \int dV \psi^* \hat{F} \sum_n c_n \psi_n.$$

Учитывая (21,1), получаем окончательно

$$\overline{F} = \int \psi^* \hat{F} \psi\, dV. \tag{22,4}$$

Отметим, что это выражение должно быть написано в несколько более общем виде, если волновая функция $\psi$ не

нормирована на единицу. В этом случае

$$\overline{F}=\frac{\int \psi^* \hat{F}\psi\, dV}{\int \psi^*\psi\, dV}. \tag{22,5}$$

Если волновая функция $\psi$ является собственной функцией оператора $\hat{F}$ $\hat{F}\psi = F_m\psi$, то величина $F$ имеет вполне определенное значение, равное собственному значению $F_m$. При этом, как и следовало ожидать, среднее значение величины $F$ совпадает с этим собственным значением $\overline{F} = F_m$.

Соотношение (22,4) может быть исходным при подборе оператора, отвечающего данной физической величине. Так, из него сразу следует, что в координатном представлении оператор координаты сводится к умножению на эту координату.

Действительно, исходя из физического смысла волновой функции, мы можем написать выражение для среднего значения координаты в виде

$$\bar{x}=\int |\psi|^2 x\, dV = \int \psi^* x\psi\, dV. \tag{22,6}$$

Сравнивая это выражение с (22,4), мы видим, что оператор координаты $\hat{x}$ сводится к умножению на координату $x$. Аналогичным образом, если мы имеем произвольную функцию от координат $U(x, y, z)$, то ее среднее значение дается выражением

$$\overline{U(x,\ y,\ z)}=\int |\psi|^2 U(x,\ y,\ z)\, dV = \int \psi^* U\psi\, dV. \tag{22,7}$$

Из этого выражения следует, что оператор произвольной функции от координат, взятый в координатном же представлении, сводится к умножению на эту функцию. Это, конечно, отвечает сделанному нами ранее утверждению. Вообще оператор, отвечающий физической величине $F$, в своем собственном $F$-представлении сводится к умножению на величину $F$. Это общее утверждение легко пояснить так же, как мы сделали на примере координаты. Среднее значение величины $F$, полученное с помощью функций $c(F)$, т. е. волновой функции в $F$-представлении, дается формулой

$$\overline{F}=\int |c(F)|^2 F\, dF = \int c^*(F) F c(F)\, dF.$$

С другой стороны, общее выражение для среднего через оператор $\hat{F}$, взятый в $F$-представлении, должно иметь вид

$$\overline{F}=\int c^*(F)\hat{F}c(F)\, dF.$$

Сравнивая эти выражения, мы видим, что оператор $\hat{F}$ в своем собственном представлении сводится к умножению на $F$.

## § 23. Коммутация операторов

Одним из важнейших вопросов, возникающих в квантовой механике, является вопрос о возможности одновременного измерения значений физических величин, относящихся к данной квантовомеханической системе.

Для того чтобы две величины $F$ и $R$ могли бы иметь определенные значения в некотором состоянии, описываемом волновой функцией $\psi_n(x)$, эта волновая функция, очевидно, должна быть собственной функцией операторов $\hat{F}$ и $\hat{R}$, т. е. должны одновременно удовлетворяться два уравнения:

$$\begin{aligned} \hat{F}\psi_n(x) &= F\psi_n(x), \\ \hat{R}\psi_n(x) &= R\psi_n(x). \end{aligned} \tag{23,1}$$

Подействуем на первое уравнение оператором $\hat{R}$, а на второе — оператором $\hat{F}$:

$$\begin{aligned} \hat{R}\hat{F}\psi_n &= \hat{R}F\psi_n = FR\psi_n, \\ \hat{F}\hat{R}\psi_n &= \hat{F}R\psi_n = RF\psi_n. \end{aligned}$$

Правые части этих уравнений равны, следовательно, равны и левые части, т. е.

$$\hat{R}\hat{F}\psi_n = \hat{F}\hat{R}\psi_n$$

или

$$(\hat{R}\hat{F} - \hat{F}\hat{R})\psi_n = 0. \tag{23,2}$$

Если общие собственные функции $\psi_n$ образуют полную систему функций, то произвольную волновую функцию $\psi$ можно разложить по этой системе функций. Действуя на функцию коммутатором $\hat{R}\hat{F} - \hat{F}\hat{R}$, мы получим, очевидно,

$$(\hat{R}\hat{F} - \hat{F}\hat{R})\psi = \sum c_n(\hat{R}\hat{F} - \hat{F}\hat{R})\psi_n = 0. \tag{23,3}$$

Символически последнее равенство можно записать в виде

$$\hat{R}\hat{F} - \hat{F}\hat{R} = 0. \tag{23,4}$$

Мы доказали таким образом, что если две квантовомеханические величины могут одновременно иметь определенные значения, то операторы, отвечающие им, должны коммутировать. Конечно, если эти величины имеют одновременно определенные значения только в некоторых особых состояниях (так что общие собственные функции $\psi_n$ не образуют полной системы функций), то соответствующие операторы не коммутируют (см., например, § 30).

Можно доказать и обратную теорему: если два оператора $\hat{F}$ и $\hat{R}$ коммутируют между собой, то они будут иметь общие собственные функции. Для доказательства подействуем на уравнение для собственных функций оператора $\hat{F}$ оператором $\hat{R}$. Воспользуемся при этом тем, что операторы $\hat{F}$ и $\hat{R}$ коммутируют между собой. Тогда получим:

$$\hat{F}(\hat{R}\psi) = F(\hat{R}\psi).$$

Мы видим, что функция $\psi' = \hat{R}\psi$ также является собственной функцией оператора $\hat{F}$, принадлежащей собственному значению $F$. Если вырождение отсутствует, то функция $\psi'$ описывает то же состояние, что и функция $\psi$, и, следовательно, может отличаться от $\psi$ лишь на постоянный множитель $R$, т. е.

$$\hat{R}\psi = R\psi.$$

Мы доказали таким образом, что функция $\psi$ будет одновременно собственной функцией операторов $\hat{F}$ и $\hat{R}$. Доказательство легко обобщается и на тот случай, когда имеется вырождение. При этом, однако, не любая собственная функция оператора $\hat{F}$ или $\hat{R}$ будет одновременно собственной функцией обоих операторов. Тем не менее для коммутирующих операторов всегда можно построить полную систему общих собственных функций.

Резюмируя сказанное, мы можем утверждать: если двум квантовомеханическим величинам отвечают коммутирующие операторы, то эти величины будут одновременно иметь определенные значения; если же операторы не коммутируют, то эти величины, вообще говоря, одновременно не могут иметь определенных значений, за исключением лишь особых случаев (см. § 30).

Поясним это одним конкретным примером. Оператор координаты $\hat{x}$ и оператор соответствующей проекции импульса $\hat{p}_x$ могут быть выбраны как пример некоммутирующих операторов. Отвечающие им величины $x$ и $p_x$, как мы знаем, одновременно (т. е. в одном и том же состоянии) не имеют определенных значений. Наоборот, операторы координаты и проекции импульса на разные оси, например $\hat{x}$ и $\hat{p}_y$, коммутируют между собой. Соответствующие величины $x$ и $p_y$ одновременно измеримы. Одновременно могут иметь определенные значения проекции импульса на разные оси $(p_x, p_y, p_z)$ или координаты $(x, y, z)$.

Мы можем теперь уточнить понятие «заданное состояние системы» в квантовой механике. Состояние системы задано, если задана волновая функция, описывающая эту систему. Однако, мы ни при каких условиях не можем непосредственно измерить

саму волновую функцию. Физический смысл имеет лишь квадрат модуля ее, трактуемый, как соответствующая вероятность. Выход из этого кажущегося противоречия заключается в следующем: когда мы говорим, что задано состояние системы, то это означает, что задано значение определенной совокупности квантовомеханических величин. Эта совокупность величин, задание которой полностью определяет состояние системы, называется полным набором квантовомеханических величин. В классической физике, чтобы задать состояние системы в какой-то момент времени, нам требовалось задать значения всех обобщенных импульсов и обобщенных координат в этот момент времени. Всего, если классическая система имеет $n$ степеней свободы, требовалось задать значения $2n$ переменных величин. Для микросистемы, т. е. системы, описываемой квантовой механикой, полный набор, очевидно, не может включать в себя и импульсы и координаты частиц, так как эти величины одновременно не имеют определенных значений. Для того чтобы задать состояние системы в квантовой механике, достаточно задать только координаты частицы или только ее импульсы или вообще любую совокупность независимых величин, одновременно измеримых и число которых равно числу степеней свободы системы. Тогда волновая функция, описывающая данное состояние системы, будет собственной функцией операторов величин, входящих в полный набор, отвечающей заданным собственным значениям.

Например, если система обладает тремя степенями свободы, то в качестве величин, образующих полный набор, могут быть выбраны проекции импульса $p_x$, $p_y$, $p_z$. Соответствующая волновая функция имеет вид (2,12).

О состояниях, характеризуемых заданием в данный момент времени некоторого полного набора величин, говорят как о состояниях, описанных полным образом, или «чистых» состояниях. Этим состояниям однозначно сопоставляется соответствующая волновая функция. В данный момент времени эта волновая функция выбирается как собственная функция операторов всех величин, входящих в полный набор. Заметим, что некоторое «чистое» состояние мы получим и в том случае, если волновая функция, отвечающая этому состоянию, представлена в виде некоторой суперпозиции собственных функций, например в виде суперпозиции плоских волн (3,3). Информацию о развитии процесса во времени мы получаем, решая уравнение Шредингера (6,8) с данным начальным условием и определяя, таким образом, волновую функцию в последующие моменты времени.

Следует заметить, что помимо «чистых» состояний иногда приходится иметь дело с так называемыми «смешанными» состояниями (см. § 89). В этих состояниях волновая функция

системы не определена. Можно говорить лишь о вероятности $P_n$ реализации того или иного «чистого» состояния $\varphi_n$ (неполное описание).

Если нас интересует вероятность измерения $F_m$-го значения величины $F$, то в «чистом» состоянии $\psi(x)$ эта вероятность определяется квадратом модуля $|c_m|^2$ соответствующей амплитуды разложения функции $\psi$ по собственным функциям $\psi_k(x)$ оператора $\hat{F}$

$$\psi(x) = \sum_k c_k \psi_k(x),$$

$$W(F_m) = |c_m|^2 = \left| \int \psi(x) \psi_m^*(x)\, dV \right|^2. \qquad (23,5)$$

Если система находится в «смешанном» состоянии, то для получения искомой вероятности мы должны разложить по функциям $\psi_k(x)$ волновые функции $\varphi_n(x)$

$$\varphi_n(x) = \sum_k c_{kn} \psi_k(x),$$

где

$$c_{kn} = \int \varphi_n(x) \psi_k^*(x)\, dV. \qquad (23,6)$$

Вероятность измерения в состоянии $\varphi_n$ $F_m$-го значения величины $F$ дается квадратом модуля амплитуды разложения $c_{mn}$. В свою очередь состояние $\varphi_n(x)$ реализуется с вероятностью $P_n$. Таким образом, окончательно, по теореме умножения вероятностей, получаем:

$$W'(F_m) = \sum_n P_n |c_{mn}|^2. \qquad (23,7)$$

Для того чтобы сравнить полученные результаты, представим волновую функцию $\psi$ в виде суперпозиции функций $\varphi_n(x)$

$$\psi(x) = \sum_n b_n \varphi_n(x).$$

Тогда, как легко видеть из (23,5) и (23,6),

$$c_m = \sum b_n c_{mn}. \qquad (23,8)$$

Подставляя это значение в выражение (23,5), получаем

$$W(F_m) = \left| \sum_n b_n c_{mn} \right|^2 = \sum_n |b_n|^2 |c_{mn}|^2 + \frac{1}{2} \sum_{n \neq k} \sum b_n b_k c_{mn} c_{mk}, \qquad (23,9)$$

причем

$$\sum_n |b_n|^2 = \sum_n P_n = 1.$$

Мы видим, что полученное выражение отличается от результата, даваемого формулой (23,7), наличием двойной суммы, которая выражает своеобразную интерференцию между состояниями. В случае «смешанных» состояний такая интерференция отсутствует.

Все приведенные рассуждения непосредственно обобщаются и на случай сплошного спектра.

## § 24. Неравенства Гейзенберга

Мы выяснили в предыдущем параграфе условия, при которых возможно одновременное измерение двух физических величин. Предположим теперь, что две физические величины $F$ и $R$ одновременно не имеют определенных значений. Тогда операторы, отвечающие этим величинам $\hat{F}$ и $\hat{R}$, не коммутируют между собой. Предположим, что имеет место соотношение

$$\hat{F}\hat{R} - \hat{R}\hat{F} = i\hat{B}, \tag{24,1}$$

где $\hat{B}$, как это следует из (17,4), некоторый эрмитов оператор.

Представляет интерес определить в общем виде, каково минимально возможное значение произведения флуктуаций данных величин. За меру, характеризующую отклонения отдельных результатов измерения величин $F$ и $R$ от их средних значений, выберем среднеквадратичные отклонения (дисперсии) $\overline{\Delta F^2}$ и $\overline{\Delta R^2}$, где

$$\Delta F = F - \overline{F}, \quad \Delta R = R - \overline{R}.$$

Для среднеквадратичных отклонений соответственно имеем

$$\begin{aligned} \overline{\Delta F^2} &= \overline{(F - \overline{F})^2} = \overline{F^2} - \overline{F}^2. \\ \overline{\Delta R^2} &= \overline{(R - \overline{R})^2} = \overline{R^2} - \overline{R}^2. \end{aligned} \tag{24,2}$$

Не ограничивая общности, мы можем положить $\overline{F} = 0$ и $\overline{R} = 0$ (иными словами, понимать под $F$ и $R$ отклонение этих величин от их среднего значения).

Рассмотрим интеграл

$$J(\alpha) = \int |(\alpha\hat{F} - i\hat{R})\psi|^2 \, dV. \tag{24,3}$$

Здесь $\psi$ — волновая функция, интегрирование производится по всей области изменения независимых переменных, а $\alpha$ — произвольный вещественный параметр. Интеграл (24,3) является не отрицательным $J(\alpha) \geqslant 0$. Перепишем его в виде

$$J(\alpha) = \int (\alpha\hat{F} - i\hat{R})\psi \cdot (\alpha\hat{F}^* + i\hat{R}^*)\psi^* \, dV.$$

Воспользовавшись самосопряженностью операторов $\hat{F}$ и $\hat{R}$, получаем

$$J(\alpha) = \int \psi^* (\alpha\hat{F} + i\hat{R})(\alpha\hat{F} - i\hat{R}) \psi \, dV =$$
$$= \int \psi^* (\alpha^2\hat{F}^2 - \alpha i (\hat{F}\hat{R} - \hat{R}\hat{F}) + \hat{R}^2) \psi \, dV.$$

Учитывая (24,1) и используя выражение (22,4) для среднего значения, имеем

$$J(\alpha) = \alpha^2\overline{F^2} + \alpha\overline{B} + \overline{R^2} = \alpha^2\,\overline{\Delta F^2} + \alpha\overline{B} + \overline{\Delta R^2}.$$

Условие того, что этот квадратичный по $\alpha$ трехчлен не отрицателен, запишется в виде

$$4\,\overline{\Delta F^2}\,\overline{\Delta R^2} \geqslant \overline{B}^2 \qquad (24,4)$$

или

$$\sqrt{\overline{\Delta F^2}\,\overline{\Delta R^2}} \geqslant \frac{1}{2}\,|\,\overline{B}\,|. \qquad (24,5)$$

Формула (24,5) дает искомое соотношение между погрешностями $\Delta F$ и $\Delta R$. Она устанавливает минимально возможное значение произведения этих погрешностей.

Рассмотрим частный случай, взяв за величины $F$ и $R$ соответственно $p_x$ и $x$. Тогда из (20,3) и (20,4) следует $\hat{B} = -\hbar$, и мы имеем:

$$\sqrt{\overline{\Delta p_x^2}}\,\sqrt{\overline{\Delta x^2}} \geqslant \frac{\hbar}{2}. \qquad (24,6)$$

Таким образом, соотношение неопределенности (24,5) имеет вполне общий характер. Соотношение неопределенности для координаты и импульса является частным случаем соотношения (24,5).

Все сопряженные квантовомеханические величины не могут быть измерены одновременно. Минимальные неточности в их значениях при одновременном измерении связаны с величиной $\overline{B}$. Наоборот, коммутирующие между собой квантовомеханические величины, для которых $\hat{B} = 0$, могут быть измерены одновременно с произвольной степенью точности.

## § 25. Скобки Пуассона

Мы рассмотрели в § 20 один из возможных методов нахождения операторов, изображающих те или иные физические величины. Более последовательно этот вопрос был рассмотрен Дираком. Дирак предположил, что в квантовой механике, так же, как и в классической, можно ввести понятие скобок Пуас-

сона[1]). Так, если двум классическим величинам $F$, $R$ отвечает скобка Пуассона,

$$[F, R] = -\sum_i \left(\frac{\partial F}{\partial p_i}\frac{\partial R}{\partial q_i} - \frac{\partial F}{\partial q_i}\frac{\partial R}{\partial p_i}\right),$$

то изображающим эти величины операторам $\hat{F}$, $\hat{R}$ отвечает квантовая скобка Пуассона $[\hat{F}, \hat{R}]$. Далее предполагалось, что свойства квантовых скобок Пуассона в точности соответствуют свойствам классических скобок Пуассона с тем лишь условием, что для квантовых скобок существен порядок сомножителей. Выпишем свойства скобок Пуассона:

$$[\hat{F}, \hat{R}] = -[\hat{R}, \hat{F}], \tag{25,1}$$

$$[\hat{F}, C] = 0, \tag{25,2}$$

где $C$ — число.

$$[\hat{F}_1 + \hat{F}_2, \hat{R}] = [\hat{F}_1, \hat{R}] + [\hat{F}_2, \hat{R}], \tag{25,3}$$

$$[\hat{F}, \hat{R}_1 + \hat{R}_2] = [\hat{F}, \hat{R}_1] + [\hat{F}, \hat{R}_2], \tag{25,4}$$

$$[\hat{F}_1\hat{F}_2, \hat{R}] = [\hat{F}_1, \hat{R}]\hat{F}_2 + \hat{F}_1[\hat{F}_2, \hat{R}], \tag{25,5}$$

$$[\hat{F}, \hat{R}_1\hat{R}_2] = [\hat{F}, \hat{R}_1]\hat{R}_2 + \hat{R}_1[\hat{F}, \hat{R}_2], \tag{25,6}$$

$$[\hat{F}_1, [\hat{F}_2, \hat{F}_3]] + [\hat{F}_3, [\hat{F}_1, \hat{F}_2]] + [\hat{F}_2[\hat{F}_3, \hat{F}_1]] = 0. \tag{25,7}$$

Выбор скобок Пуассона как основы для построения системы квантовомеханических операторов связан с тем, что они, как мы увидим, непосредственно выражаются через коммутаторы соответствующих операторов. Последняя комбинация операторов является основой для их физического толкования.

Рассмотрим скобку Пуассона $[\hat{F}_1\hat{F}_2, \hat{R}_1\hat{R}_2]$, для вычисления которой можно воспользоваться выражениями (25,5) и (25,6). Соответственно получим:

$$[\hat{F}_1\hat{F}_2, \hat{R}_1\hat{R}_2] = [\hat{F}_1, \hat{R}_1\hat{R}_2]\hat{F}_2 + \hat{F}_1[\hat{F}_2, \hat{R}_1\hat{R}_2] =$$
$$= [\hat{F}_1, \hat{R}_1]\hat{R}_2\hat{F}_2 + \hat{R}_1[\hat{F}_1, \hat{R}_2]\hat{F}_2 + \hat{F}_1[\hat{F}_2, \hat{R}_1]\hat{R}_2 + \hat{F}_1\hat{R}_1[\hat{F}_2, \hat{R}_2]$$

и

$$[\hat{F}_1\hat{F}_2, \hat{R}_1\hat{R}_2] = [\hat{F}_1\hat{F}_2, \hat{R}_1]\hat{R}_2 + \hat{R}_1[\hat{F}_1\hat{F}_2, \hat{R}_2] =$$
$$= \hat{F}_1[\hat{F}_2, \hat{R}_1]\hat{R}_2 + [\hat{F}_1, \hat{R}_1]\hat{F}_2\hat{R}_2 + \hat{R}_1\hat{F}_1[\hat{F}_2, \hat{R}_2] + \hat{R}_1[\hat{F}_1, \hat{R}_2]\hat{F}_2.$$

---

[1]) О скобках Пуассона в классической механике см. Л. Д. Ландау и Е. М. Лифшиц, Механика, Физматгиз, 1958, стр. 169; Г. Голдстейн, Классическая механика, Гостехиздат, 1957, стр. 274.

Приравнивая оба полученных результата, находим

$$(\hat{F}_1\hat{R}_1 - \hat{R}_1\hat{F}_1)[\hat{F}_2, \hat{R}_2] = [\hat{F}_1, \hat{R}_1](\hat{F}_2\hat{R}_2 - \hat{R}_2\hat{F}_2).$$

Поскольку последнее равенство должно удовлетворяться тождественно, имеем:

$$[\hat{F}_1, \hat{R}_1] = iC(\hat{F}_1\hat{R}_1 - \hat{R}_1\hat{F}_1),$$
$$[\hat{F}_2, \hat{R}_2] = iC(\hat{F}_2\hat{R}_2 - \hat{R}_2\hat{F}_2),$$

где $C$ — некоторая вещественная постоянная.

Вещественность $C$ следует из того, что скобка Пуассона двух действительных переменных также должна быть вещественной. Так, если $\hat{F}^+ = \hat{F}$, $\hat{R}^+ = \hat{R}$, то должно быть $[\hat{F}, \hat{R}]^+ = [\hat{F}, \hat{R}]$. Однако

$$[\hat{F}, \hat{R}]^+ = -iC^*(\hat{F}\hat{R} - \hat{R}\hat{F})^+ = -iC^*(\hat{R}\hat{F} - \hat{F}\hat{R}) = \frac{C^*}{C}[\hat{F}, \hat{R}]$$

и поэтому $C^* = C$. Из классической теории скобок Пуассона следует, что постоянная $C$ имеет размерность 1/*эрг сек*. Ее числовое значение может быть определено только путем сравнения выводов теории с опытными данными. Оно оказалось равным $\frac{1}{\hbar}$. Окончательно имеем

$$(\hat{F}\hat{R} - \hat{R}\hat{F}) = \frac{\hbar}{i}[\hat{F}, \hat{R}]. \tag{25,8}$$

При переходе к классической механике[1]), т. е. при $\hbar \to 0$ коммутатор $\{\hat{F}\hat{R}\}$, как это и следовало ожидать, обращается в нуль. Естественно допустить, что, хотя бы в простейших случаях, сами квантовые скобки Пуассона имеют те же значения, что и классические скобки. Для канонически сопряженных переменных координат и импульсов в классической механике имеем

$$[p_i, p_k] = 0,$$
$$[x_i, x_k] = 0,$$
$$[p_i, x_k] = \delta_{ik} \qquad (i, k = 1, 2, 3). \tag{25,9}$$

Здесь и в дальнейшем мы используем такие обозначения:

$$x_1 = x, \qquad p_1 = p_x,$$
$$x_2 = y, \qquad p_2 = p_y,$$
$$x_3 = z, \qquad p_3 = p_z.$$

Такие же выражения можно написать для квантовых операторов координаты и проекции импульса. Поэтому коммутаторы

[1]) Подробнее см. гл. V.

соответствующих величин приобретают вид:

$$\hat{x}_i\hat{x}_k - \hat{x}_k\hat{x}_i = 0,$$
$$\hat{p}_i\hat{p}_k - \hat{p}_k\hat{p}_i = 0,$$
$$\hat{p}_i\hat{x}_k - \hat{x}_k\hat{p}_i = \frac{\hbar}{i}\delta_{ik} \qquad (i,\ k = 1,\ 2,\ 3). \tag{25,10}$$

Мы воспользуемся этими равенствами для определения операторов координаты и импульса.

## § 26. Операторы и собственные функции координаты и импульса

Начнем с установления вида операторов в координатном представлении[1]). В этом представлении волновая функция, характеризующая состояние частицы, зависит от ее координат $\psi(x, y, z)$. Координаты $x$, $y$, $z$ являются независимыми переменными. Поэтому отвечающие им операторы, в соответствии с выводами § 20 и § 22, сводятся к умножению на эти координаты

$$\hat{x}_i = x_i \qquad (i = 1,\ 2,\ 3). \tag{26,1}$$

Перестановочные соотношения (25,10) перепишем в виде

$$(\hat{p}_k x_k - x_k\hat{p}_k)\,\psi = \frac{\hbar}{i}\psi \qquad (k = 1,\ 2,\ 3), \tag{26,2}$$
$$(\hat{p}_i x_k - x_k\hat{p}_i)\,\psi = 0 \qquad (i \neq k), \tag{26,3}$$
$$(\hat{p}_i\hat{p}_k - \hat{p}_k\hat{p}_i)\,\psi = 0 \qquad (i,\ k = 1,\ 2,\ 3). \tag{26,4}$$

Уравнениям (26,2)—(26,4) можно удовлетворить произвольной функцией $\psi$, положив

$$\hat{p}_k = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x_k} + \frac{\partial\alpha(x_1, x_2, x_3)}{\partial x_k}, \tag{26,5}$$

где $\alpha(x_1, x_2, x_3)$ — произвольная вещественная функция. Вещественность $\alpha$ требуется для эрмитовости оператора $\hat{p}_k$. Функцию $\alpha$ можно без ограничения общности результата положить равной нулю. Действительно, действие оператора (26,5) на произвольную функцию $\psi$ переводит ее в функцию $\psi' = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial\psi}{\partial x_k} + \frac{\partial\alpha}{\partial x_k}\psi$. С другой стороны, если мы подействуем на функцию $e^{\frac{i}{\hbar}\alpha}\psi$ оператором $\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x_k}$, то получим функцию $e^{\frac{i}{\hbar}\alpha}\psi'$. Следовательно, переход от оператора (26,5) к оператору $\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x_k}$

[1]) См. В. А. Фок, Начала квантовой механики, Кубуч, 1932, стр. 32.

эквивалентен переходу от волновой функции $\psi$ к функции $e^{\frac{i}{\hbar}\alpha}\psi$

$$\psi \to e^{\frac{i}{\hbar}\alpha}\psi,$$

$$\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x_k} + \frac{\partial \alpha}{\partial x_k} \to \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x_k} = e^{\frac{i}{\hbar}\alpha}\left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x_k} + \frac{\partial \alpha}{\partial x_k}\right)e^{-\frac{i}{\hbar}\alpha}, \qquad (26,6)$$

так как

$$e^{\frac{i}{\hbar}\alpha}\left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x_k} + \frac{\partial \alpha}{\partial x_k}\right)e^{-\frac{i}{\hbar}\alpha}e^{\frac{i}{\hbar}\alpha}\psi = e^{\frac{i}{\hbar}\alpha}\psi' = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x_k}\left(e^{\frac{i}{\hbar}\alpha}\psi\right).$$

Как мы увидим, в § 46 волновая функция всегда определена с точностью до некоторого так называемого унитарного преобразования, частным случаем которого является преобразование (26,6).

Операторы (26,5) и операторы

$$\hat{p}_k = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x_k} \qquad (k = x,\ y,\ z)$$

имеют одинаковый спектр собственных значений. Поэтому, не ограничивая общности, можно вместо операторов (26,5) пользоваться операторами для проекций импульса, имеющими в координатном представлении вид (ср. § 20)

$$\hat{p}_x = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}; \qquad \hat{p}_y = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial y}; \qquad \hat{p}_z = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial z} \qquad (26,7)$$

или, в векторной форме,

$$\hat{\boldsymbol{p}} = \frac{\hbar}{i}\nabla, \qquad (26,8)$$

где $\nabla$ — оператор градиента.

Воспользуемся теперь не координатным, а импульсным представлением, в котором волновая функция зависит от трех проекций импульса: $p_x$, $p_y$, $p_z$. Отвечающие им операторы сводятся к умножению на величины $p_x$, $p_y$, $p_z$. Оператор координаты в этом представлении находится на основании тех же соотношений коммутации и оказывается равным

$$\hat{x} = i\hbar\frac{\partial}{\partial p_x}; \qquad \hat{y} = i\hbar\frac{\partial}{\partial p_y}; \qquad \hat{z} = i\hbar\frac{\partial}{\partial p_z}, \qquad (26,9)$$

или

$$\hat{\boldsymbol{r}} = i\hbar\left(\boldsymbol{i}\frac{\partial}{\partial p_x} + \boldsymbol{j}\frac{\partial}{\partial p_y} + \boldsymbol{k}\frac{\partial}{\partial p_z}\right) \equiv i\hbar\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{p}}.$$

Пользуясь (26,7), легко установить перестановочные соотношения оператора $\hat{\boldsymbol{p}}$ и произвольной функции $U(x, y, z)$

$$\hat{\boldsymbol{p}}U - U\hat{\boldsymbol{p}} = \frac{\hbar}{i}\nabla U. \qquad (26,10)$$

Аналогичным образом вычисляется коммутация оператора $\hat{\boldsymbol{r}}$ с произвольной функцией $f(p_x, p_y, p_z)$

$$\hat{\boldsymbol{r}}f - f\hat{\boldsymbol{r}} = i\hbar\frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{p}}. \tag{26,11}$$

Уравнения для собственных функций и собственных значений операторов $\hat{p}_x$, $\hat{p}_y$, $\hat{p}_z$ имеют вид

$$\frac{\hbar}{i}\frac{\partial\psi_{p_x}}{\partial x} = p_x\psi_{p_x}, \quad \frac{\hbar}{i}\frac{\partial\psi_{p_y}}{\partial y} = p_y\psi_{p_y}, \quad \frac{\hbar}{i}\frac{\partial\psi_{p_z}}{\partial z} = p_z\psi_{p_z}. \tag{26,12}$$

Выпишем решение первого уравнения:

$$\psi_{p_x} = a(y, z)\, e^{\frac{i}{\hbar}p_x x},$$

где $a(y, z)$ — произвольная функция. Аналогичные решения имеются и для функций $\psi_{p_y}$ и $\psi_{p_z}$. Функции $\psi_{p_x}$, $\psi_{p_y}$, $\psi_{p_z}$ удовлетворяют необходимым требованиям, в частности условию конечности (см. § 16) при любых вещественных значениях $p_x$, $p_y$, $p_z$. Таким образом, оператор импульса имеет сплошной спектр собственных значений. Волновая функция

$$\psi_p = Ae^{\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{pr}}, \tag{26,13}$$

где $A$ — постоянная, является собственной функцией операторов $\hat{p}_x$, $\hat{p}_y$, $\hat{p}_z$ и описывает состояние с заданным импульсом $\boldsymbol{p}$. В таком состоянии может находиться свободно двигающаяся частица. Этот вывод находится в полном соответствии с результатом § 2.

Постоянная $A$ определяется из условия нормировки. Так как оператор импульса обладает сплошным спектром, то его собственные функции удобно нормировать на $\delta$-функцию. Найдем сначала нормировочный коэффициент $A$ в случае одномерного движения.

Полагая $\int \psi^*_{p_x}\psi_{p'_x}\,dx = \delta(p_x - p'_x)$ и учитывая (III, 5), получаем $A = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}}$, так что окончательно

$$\psi_{p_x} = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}}\, e^{\frac{i}{\hbar}p_x x}. \tag{26,14}$$

В трехмерном случае для волновой функции (26, 13) соответственно имеем

$$\psi_p = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\, e^{\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{pr}}. \tag{26,15}$$

Иногда оказывается более удобным другой способ нормировки плоских волн, именуемый нормировкой в «ящике». Зададим волновую функцию в произвольно большом, но конечном объеме $V$. В качестве нормировочного объема выберем куб с длиной ребра $L$ и центром в начале координат. Потребуем, чтобы на стенках куба волновые функции (26,12) удовлетворяли условию периодичности, т. е. в соответствующих точках противоположных граней куба волновые функции принимали бы одинаковые значения. При этих условиях вектор импульса уже не изменяется непрерывным образом, а пробегает дискретный набор значений

$$p_x = \frac{2\pi\hbar}{L} n_x; \qquad p_y = \frac{2\pi\hbar}{L} n_y; \qquad p_z = \frac{2\pi\hbar}{L} n_z, \tag{26,16}$$

где $n_x$, $n_y$, $n_z$ — положительные или отрицательные целые числа, включая нуль. Выбирая ребро куба $L$ достаточно большим, можно сделать расстояние между соседними собственными значениями вектора импульса сколь угодно малыми. Нормировочный коэффициент, определяемый из условия

$$|A|^2 \int\limits_{L^3} \left| e^{\frac{i}{\hbar} pr} \right|^2 dV = 1,$$

равен $A = \frac{1}{L^{3/2}}$. Соответственно волновая функция при такой нормировке имеет вид

$$\psi_p = \frac{1}{L^{3/2}} e^{\frac{i}{\hbar} pr} = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{\frac{i}{\hbar} pr}. \tag{26,17}$$

В §§ 12 и 13 мы нормировали волновые функции вида (26,13), задавая плотность потока вероятности $j_0$. Действительно, в этом состоянии согласно (7, 6)

$$j_0 = |A|^2 \frac{p}{m}. \tag{26,18}$$

Полагая, например, $A = 1$, получаем

$$j_0 = \frac{p}{m} = v, \tag{26,19}$$

т. е. при такой нормировке плотность потока вероятности численно равна скорости частицы. Если же $A = \frac{1}{\sqrt{v}}$, то это соответствует нормировке на единичную плотность потока вероятности и т. д.

Легко видеть, что операторы $\hat{p}_x$, $\hat{p}_y$, $\hat{p}_z$ простым образом связаны с операторами бесконечно малого сдвига соответственно по осям $x$, $y$, $z$. Действительно, сдвинем нашу систему или, что

эквивалентно, начало координат вдоль оси $x$ на расстояние $\Delta x$. Тогда старые и новые координаты связаны соотношением

$$x' = x - \Delta x, \quad y' = y, \quad z' = z.$$

Выразим функцию $\psi(x, y, z)$ через новые координаты $x'$, $y'$, $z'$. Соответственно получим, ограничиваясь первым членом разложения в ряд

$$\psi(x, y, z) = \psi(x' + \Delta x, y', z') = \psi(x', y', z') + \frac{\partial \psi}{\partial x'} \Delta x = \\ = \left(1 + \Delta x \frac{\partial}{\partial x'}\right) \psi(x', y', z').$$

Оператор $\left(1 + \Delta x \frac{\partial}{\partial x'}\right)$ естественно назвать оператором сдвига на расстояние $\Delta x$ вдоль оси $x$. Обозначим этот оператор через $\hat{R}_{x'}$ так, что

$$\psi(x, y, z) = \hat{R}_{x'} \psi(x', y', z'). \tag{26,20}$$

Мы видим, что оператор сдвига $\hat{R}_x$ связан с оператором соответствующей проекции импульса $\hat{p}_x$

$$\hat{R}_x = 1 + \frac{i}{\hbar} \Delta x \hat{p}_x. \tag{26,21}$$

Вид оператора импульса $\hat{p}_x$ можно было бы получить также, исходя из выражения для оператора $\hat{R}_x$ [1]).

Выпишем уравнение для собственных функций и собственных значений оператора координаты в координатном же представлении

$$\hat{x} \psi_{x_0}(x) = x_0 \psi_{x_0}(x). \tag{26,22}$$

Здесь $x_0$ — некоторое конкретное значение координаты $x$. Оператор $\hat{x}$ в своем собственном представлении сводится к умножению на $x$. При этом из уравнения (26,22) следует, что

$$\psi_{x_0}(x) = 0 \quad \text{при} \quad x \neq x_0.$$

Кроме того, функции $\psi_{x_0}(x)$ должны удовлетворять условию ортогональности и нормировки

$$\int \psi^*_{x_0}(y) \psi_{x'_0}(x) \, dx = \delta(x_0 - x'_0).$$

Из этих соотношений вытекает, что функция $\psi_{x_0}(x)$ имеет вид (см. приложение III)

$$\psi_{x_0}(x) = \delta(x - x_0). \tag{26,23}$$

---

[1]) См. Л. Д. Ландау и Е. М. Лифшиц, Квантовая механика, Физматгиз, 1963, стр. 61. Аналогичное заключение относится и к операторам проекции импульса на оси $y$ и $z$.

Аналогичным образом запишутся собственные функции операторов $\hat{y}$ и $\hat{z}$. Так как операторы проекций координат $\hat{x}$, $\hat{y}$, $\hat{z}$ коммутируют между собой, их величины измеримы одновременно. Соответственно, если система обладает тремя степенями свободы, три проекции координат $x$, $y$, $z$ могут быть выбраны в качестве величин, образующих полный набор. Волновая функция, описывающая состояние с тремя заданными координатами $x_0$, $y_0$, $z_0$, имеет вид

$$\psi_{r_0}(\boldsymbol{r}) = \delta(x - x_0)\,\delta(y - y_0)\,\delta(z - z_0) = \delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}_0). \qquad (26,24)$$

Аналогичным образом напишется и собственная функция оператора импульса в импульсном же представлении.

## § 27. Оператор Гамильтона

Важнейшим оператором квантовой механики является оператор полной энергии $\hat{H}$. Как и в классической механике, он слагается из операторов кинетической и потенциальной энергии. Построим, прежде всего, оператор кинетической энергии частицы. Кинетическая энергия связана с импульсом частицы в нерелятивистском приближении, которым мы сейчас только и интересуемся, обычным соотношением

$$T = \frac{\boldsymbol{p}^2}{2m} = \frac{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}{2m}. \qquad (27,1)$$

Заменяя в этом соотношении импульс частицы $\boldsymbol{p}$ на оператор $\hat{\boldsymbol{p}}$, получим оператор $\hat{T}$, который назовем оператором кинетической энергии (см. также § 20)

$$\hat{T} = \frac{1}{2m}\hat{\boldsymbol{p}}^2 = \frac{1}{2m}\left(\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2\right) \equiv -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta. \qquad (27,2)$$

Оператор кинетической энергии, очевидно, коммутирует с оператором импульса.

Перейдем теперь к оператору полной энергии $\hat{H}$. Поскольку потенциальная энергия зависит только от координат $x$, $y$, $z$, отвечающий ей оператор в координатном представлении просто совпадает с функцией $U(x, y, z)$. Соответственно имеем:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U(x, y, z). \qquad (27,3)$$

Поскольку в формуле (27, 3) оператор полной энергии выражен через оператор импульса (но не оператор скорости), он представляет квантовомеханический оператор Гамильтона, часто именуемый гамильтонианом. Выражение для гамильтониана может быть легко обобщено на случай, когда частица движется

в нестационарных внешних полях. При этом

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U(\boldsymbol{r}, t), \tag{27,4}$$

где $U(\boldsymbol{r}, t)$ — так называемая силовая функция, связанная с силой, действующей на частицу соотношением

$$\boldsymbol{f} = -\nabla U.$$

Найденные формулы для оператора Гамильтона неприменимы в случае движения частицы в поле сил, зависящих от ее скорости. К ним относится, прежде всего, случай движения заряженной частицы в магнитном поле.

Для получения оператора Гамильтона в этом случае воспользуемся общими правилами. Выпишем функцию Гамильтона классической механики для частиц, движущихся в электромагнитном поле. Согласно (41, 4) ч. I, имеем

$$H = \frac{1}{2m}\left(\boldsymbol{p} - \frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)^2 + e\varphi, \tag{27,5}$$

где вектор $\boldsymbol{p}$ — обобщенный импульс частицы, а $\boldsymbol{A}$ и $\varphi$ — векторный и скалярный потенциалы, $e$ — заряд частицы. Согласно общему правилу, заменим в формуле (27,5) функцию Гамильтона оператором Гамильтона, обобщенный импульс — оператором импульса. Векторный и скалярный потенциал, зависящие только от координат и времени, можно оставить без изменений, поскольку в координатном представлении применение соответствующих операторов сводится к умножению на эти функции. Тогда находим:

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\left(\hat{\boldsymbol{p}} - \frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)^2 + e\varphi. \tag{27,6}$$

С помощью найденного нами оператора Гамильтона основное уравнение квантовой механики — уравнение Шредингера — может быть представлено в виде

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \hat{H}\psi. \tag{27,7}$$

Операторная форма записи уравнения Шредингера имеет наиболее общий характер и пригодна для описания движения частицы в произвольном стационарном или нестационарном поле. В частности, в таком виде оно справедливо и в случае движения частицы в электромагнитном поле. Как и классическую функцию Гамильтона, гамильтониан можно преобразовать к произвольной криволинейной системе координат. Для этого следует лишь преобразовать к этой системе дифференциальный оператор Лапласа $\Delta$. В зависимости от симметрии поля сил удобно выбирать ту или иную систему криволинейных координат.

в которой выражение для потенциальной энергии частицы приобретает наиболее простой вид. В частности, как мы увидим в § 35, часто удобно записывать оператор Гамильтона в сферической системе координат.

Оператор Гамильтона системы частиц может быть построен по той же схеме, которая была уже успешно применена к случаю одной частицы. Именно, следует написать классическое выражение для функции Гамильтона, а затем заменить все входящие в него величины на квантовомеханические операторы.

Классическое выражение для гамильтониана системы $N$ частиц имеет вид

$$H = \sum_{k=1}^{N} \frac{p_k^2}{2m_k} + \sum_{k=1}^{N} U_k(\mathbf{r}_k) + U_{\text{вз}}, \tag{27,8}$$

где $p_k$, $m_k$ и $U_k(\mathbf{r}_k)$ соответственно импульс, масса и потенциальная энергия $k$-й частицы во внешнем поле; $U_{\text{вз}}$ — потенциальная энергия взаимодействия частиц.

Оператор Гамильтона мы получим, если заменим импульсы частиц на соответствующие операторы $\hat{p}_k$, где индекс $k$ обозначает дифференцирование по координатам $k$-й частицы. После указанной замены получим уравнение Шредингера. Оно имеет вид

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \hat{H}\psi, \quad \hat{H} = \sum_{k=1}^{N} -\frac{\hbar^2}{2m_k}\Delta_k + \sum_{k=1}^{N} U_k(\mathbf{r}_k) + U_{\text{вз}}. \tag{27,9}$$

Очевидным образом обобщается и выражение оператора Гамильтона (27, 6) для системы заряженных частиц, находящихся во внешнем электромагнитном поле.

## § 28. Стационарные состояния

Предположим, что гамильтониан системы не зависит от времени явно. В этом случае уравнение Шредингера (27,7) допускает разделение переменных. Этим обстоятельством мы воспользовались уже в § 6. Однако сейчас мы можем более глубоко проанализировать получающееся при этом решение.

Ищем решение уравнения Шредингера (27,7) в виде

$$\psi(x, t) = \chi(t)\,\psi(x), \tag{28,1}$$

где под $x$ мы понимаем всю совокупность координат, от которых зависит волновая функция.

Подставляя это выражение в (27,7), получаем

$$i\hbar\frac{d\chi(t)}{dt}\psi(x) = \chi(t)\,\hat{H}\psi(x).$$

Разделив левую и правую части последнего уравнения на $\psi(x, t)$, имеем

$$i\hbar \frac{d\chi}{dt} \frac{1}{\chi} = \frac{\hat{H}\psi(x)}{\psi(x)}.$$

Отношение, стоящее в левой части равенства, может зависеть только от времени $t$, а отношение, стоящее в правой части — только от координат системы. Из равенства этих отношений следует, что каждое из них равно одной и той же постоянной, которую обозначим через $E$. Тогда получим:

$$\chi(t) = Ce^{-\frac{i}{\hbar}Et}, \quad \hat{H}\psi(x) = E\psi(x),$$

где $C$ — произвольная постоянная.

Мы видим, что постоянная $E$ имеет смысл собственного значения оператора $\hat{H}$, т. е. определяет возможные значения энергии системы, а функция $\psi(x)$ описывает состояние с заданной энергией.

Оператор Гамильтона может обладать как дискретным, так и непрерывным спектром, как мы это видели на разобранных выше примерах. Часто приходится встречаться и со смешанным спектром: дискретным в одном интервале энергий и сплошным в другом.

Предполагая для определенности, что оператор $\hat{H}$ обладает дискретным спектром, выпишем волновые функции (28,1)

$$\psi_n(x, t) = \psi_n(x) e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t}. \qquad (28,2)$$

Состояния системы, описываемые волновыми функциями типа (28, 2), называются стационарными. Волновые функции стационарных состояний зависят от времени по гармоническому закону с частотами $\omega_n = \frac{E_n}{\hbar}$. Как мы уже отмечали в § 6, в стационарном состоянии плотность вероятности нахождения частицы в данной точке пространства не зависит от времени. Действительно,

$$W_n(x, t) = |\psi_n(x, t)|^2.$$

Подставляя выражение (28, 2) для волновой функции, найдем

$$W_n(x, t) = |\psi_n(x)|^2 = W_n(x, 0). \qquad (28,3)$$

Можно легко обобщить это утверждение. Вероятность $W(F_k, t)$ наблюдать собственное значение $F_k$, в стационарном состоянии $\psi_n(x, t)$ не зависит от времени. По общим правилам (см. § 21), для того чтобы получить искомую вероятность, мы должны разложить волновую функцию $\psi_n(x, t)$ по собственным

функциям $\psi_{F_k}$ оператора $\hat{F}$, и взять квадрат модуля соответствующей амплитуды разложения $c_k$. По формуле (19,2)

$$c_k(t) = \int \psi_n(x, t)\psi^*_{F_k}(x)\,dV = e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}\int \psi_n(x)\psi^*_{F_k}(x)\,dV.$$

Соответствующая вероятность $W(F_k, t)$ равна

$$W(F_k, t) = |c_k(t)|^2 = \left|\int \psi_n(x)\psi^*_{F_k}(x)\,dV\right|^2 = W(F_k, 0). \quad (28,4)$$

Произвольное решение уравнения Шредингера $\psi(x, t)$ может быть разложено по волновым функциям (28, 2). Функция $\psi(x, t)$ при этом описывает состояние, в котором энергия системы не имеет определенного значения.

## § 29. Интегральная форма уравнения Шредингера

Оказывается, что дифференциальному уравнению Шредингера можно сопоставить интегральное уравнение. В ряде случаев последняя форма имеет ряд преимуществ как с принципиальной стороны, так и с точки зрения чисто расчетных удобств. Принципиальное достоинство интегрального представления уравнений квантовой механики тесно связано с развитием идей Фейнмана[1]) и с квантовой теорией поля (см. гл. XIV).

В § 58 мы подробно остановимся на достоинствах приближенных методов решения уравнения Шредингера в интегральной форме.

Рассмотрим одну частицу с гамильтонианом $\hat{H}$, зависящим, вообще говоря, от времени. Пусть в начальный момент времени задана волновая функция

$$\psi_0 = \psi(\mathbf{r}_1, t_1). \quad (29,1)$$

Волновая функция удовлетворяет уравнению Шредингера

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \hat{H}\psi. \quad (29,2)$$

Волновая функция частицы, удовлетворяющая уравнению (29,2) при граничном условии (29,1) в момент времени $t_2 > t_1$, может быть представлена в виде

$$\psi(\mathbf{r}_2, t_2) = \int K(\mathbf{r}_2, t_2; \mathbf{r}_1, t_1)\,\psi(\mathbf{r}_1, t_1)\,d\mathbf{r}_1. \quad (29,3)$$

Функция $K(\mathbf{r}_2, t_2; \mathbf{r}_1, t_1)$ является функцией Грина уравнения (29,2) (ср. § 19). Формула (29,3) допускает наглядную

---

[1]) См. Р. Фейнман, А. Хитс, Квантовая механика и интегралы по траекториям, «Мир», 1968.

интерпретацию: функция Грина представляет амплитуду перехода частицы из начального состояния с волновой функцией $\psi(\boldsymbol{r}_1, t_1)$ в состояние с волновой функцией $\psi(\boldsymbol{r}_2, t_2)$, где $t_2 > t_1$.

Поскольку формула (29, 3) определяет волновую функцию только при $t_2 > t_1$, функцию Грина можно доопределить требованием

$$K(\boldsymbol{r}_2, t_2;\ \boldsymbol{r}_1, t_1) = 0 \quad \text{при} \quad t_2 < t_1.$$

Для того чтобы соотношение (29, 3) было эквивалентно (29, 2) и (29, 1), функция Грина должна удовлетворять уравнению

$$\left[i\hbar \frac{\partial}{\partial t_2} - \hat{H}(\boldsymbol{r}_2, t_2)\right] K(\boldsymbol{r}_2, t_2;\ \boldsymbol{r}_1, t_1) = i\hbar\delta(t_2 - t_1)\,\rho(\boldsymbol{r}_2 - \boldsymbol{r}_1). \qquad (29,4)$$

Действительно, при $t_2 > t_1$ функция Грина удовлетворяет уравнению

$$\left[i\hbar \frac{\partial}{\partial t_2} - \hat{H}(\boldsymbol{r}_2, t_2)\right] K(\boldsymbol{r}_2, t_2;\ \boldsymbol{r}_1, t_1) = 0. \qquad (29,5)$$

Действуя на обе части (29,3) оператором $\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t_2} - \hat{H}\right)$ при $t_2 > t_1$ и учитывая уравнение (29,5), приходим к тождеству. В том, что определенная уравнением (29,4) функция Грина удовлетворяет начальному условию (29,1) при $t_2 = t_1$, легко убедиться, если проинтегрировать (29,4) по бесконечно малому интервалу $2\Delta t \to 0$ около момента $t_1$.

Тогда имеем

$$\int\limits_{t_1-\Delta t}^{t_1+\Delta t} \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t_2} - \hat{H}(\boldsymbol{r}_2, t_2)\right) K(\boldsymbol{r}_2, t_2;\ \boldsymbol{r}_1, t_1)\, dt_2 =$$

$$= i\hbar\delta(\boldsymbol{r}_2 - \boldsymbol{r}_1) \int\limits_{t_1-\Delta t}^{t_1+\Delta t} \delta(t_2 - t_1)\, dt_2 = i\hbar\delta(\boldsymbol{r}_2 - \boldsymbol{r}_1).$$

Имеем, очевидно,

$$\lim_{\Delta t \to 0} \int\limits_{t_1-\Delta t}^{t_1+\Delta} \hat{H}(\boldsymbol{r}_2, t_2)\, K(\boldsymbol{r}_2, t_2;\ \boldsymbol{r}_1, t_1)\, dt_2 = 0,$$

$$\lim_{\Delta t \to 0} \int\limits_{t_1-\Delta t}^{t_1+\Delta t} i\hbar \frac{\partial}{\partial t_2} K(\boldsymbol{r}_2, t_2;\ \boldsymbol{r}_1, t_1)\, dt_2 = i\hbar K(\boldsymbol{r}_2, t_1;\ \boldsymbol{r}_1, t_1),$$

откуда

$$K(\boldsymbol{r}_2, t_1;\ \boldsymbol{r}_1, t_1) = \delta(\boldsymbol{r}_2 - \boldsymbol{r}_1). \qquad (29,6)$$

Таким образом, если функция Грина удовлетворяет уравнению (29,4), то (29,3) представляет собой решение уравнения Шредингера с соответствующим начальным условием (задача Коши).

Иными словами, если известна амплитуда перехода, то тем самым известна и волновая функция. С другой стороны, амплитуда перехода обладает некоторыми важными особенностями, делающими ее в ряде отношений более удобной (хотя и столь же полной характеристикой системы), чем волновая функция.

Рассмотрим сначала случай, когда гамильтониан $\hat{H}_0$ системы не зависит от времени явно. Тогда можно найти общую связь между волновыми функциями стационарных состояний $\psi_n(\boldsymbol{r}, t)$ и уровнями энергии системы и амплитудой перехода. Последнюю для системы с гамильтонианом $\hat{H}_0$ мы будем обозначать как $K_0$. Амплитуда должна удовлетворять уравнению

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t_2} - \hat{H}_0(\boldsymbol{r}_2)\right) K_0(2,\ 1) = i\hbar\delta(t_2 - t_1)\,\delta(\boldsymbol{r}_2 - \boldsymbol{r}_1). \tag{29,7}$$

Если $\hat{H}_0$ не зависит от времени явно, то волновую функцию, удовлетворяющую уравнению (29, 2), можно представить в виде

$$\psi_n(\boldsymbol{r},\ t) = u_n(\boldsymbol{r})\, e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t},$$

где $\psi_n$ образует полный набор ортонормированных функций. В силу последнего свойства $\psi_n$ всегда можно написать разложение

$$K_0(2,\ 1) \equiv K_0(\boldsymbol{r}_2,\ t_2;\ \boldsymbol{r}_1,\ t_1) = \sum c_n(\boldsymbol{r}_1,\ t_1)\,\psi_n(\boldsymbol{r}_2,\ t_2)\,\theta(t_2 - t_1), \tag{29,8}$$

где $\theta(t_2 - t_1)$ — ступенчатая функция

$$\theta(x) = \begin{cases} 1, & x > 0, \\ 0, & x < 0. \end{cases} \tag{29,9}$$

С помощью $\theta$-функции учтено поведение $K_0$ при $t_2 < t_1$. Подставляя разложение (29,8) в (29,4), находим

$$\left[i\hbar \frac{\partial}{\partial t_2} - \hat{H}_0(\boldsymbol{r}_2)\right] \sum c_n(\boldsymbol{r}_1,\ t_1)\,\psi_n(\boldsymbol{r}_2,\ t_2)\,\theta(t_2 - t_1) =$$
$$= i\hbar \sum c_n\psi_n \frac{d\theta(t_2 - t_1)}{dt_2} + \sum c_n\theta(t_2 - t_1)\left[i\hbar\frac{\partial}{\partial t_2} - \hat{H}_0(\boldsymbol{r}_2)\right]\psi_n =$$
$$= i\hbar \sum c_n\psi_n\delta(t_2 - t_1).$$

С другой стороны,

$$\left[i\hbar \frac{\partial}{\partial t_2} - \hat{H}_0(\boldsymbol{r}_2)\right] \sum c_n\psi_n\theta(t_2 - t_1) = i\hbar\delta(t_2 - t_1)\,\delta(\boldsymbol{r}_2 - \boldsymbol{r}_1),$$

откуда

$$\sum c_n\psi_n = \delta(\boldsymbol{r}_2 - \boldsymbol{r}_1).$$

Но для $\psi_n$ имеет место условие полноты (см. (19,4))

$$\sum \psi_n^*(\boldsymbol{r}_1)\,\psi_n(\boldsymbol{r}_2) = \delta(\boldsymbol{r}_2 - \boldsymbol{r}_1).$$

Поэтому для коэффициентов $c_n$ находим

$$c_n = \psi_n^*$$

и окончательно получаем

$$K_0(2,\ 1) \equiv K_0(\boldsymbol{r}_2,\ t_2;\ \boldsymbol{r}_1,\ t_1) = \\ = \theta(t_2 - t_1) \sum_n u_n(\boldsymbol{r}_2)\, u_n^*(\boldsymbol{r}_1) \exp\left[-\frac{i}{\hbar} E_n (t_2 - t_1)\right]. \quad (29{,}10)$$

Суммирование переходит в интегрирование в случае непрерывного спектра. В виде примера получим явное выражение для функции Грина свободной частицы. В этом случае

$$\psi = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \exp(i\boldsymbol{pr}) \exp\left[-\frac{ip^2 t}{2m\hbar}\right],$$

так что

$$K_0(\boldsymbol{r}_2,\ t_2;\ \boldsymbol{r}_1,\ t_1) = \\ = \theta(t_2 - t_1) \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int \exp[-i\boldsymbol{p}(\boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_2)] \exp\left[-\frac{ip^2(t_2 - t_1)}{2m\hbar}\right] d\boldsymbol{p} = \\ = \frac{\theta(t_2 - t_1)}{[2\pi i\hbar (t_2 - t_1)/m]^{3/2}} \exp\left[\frac{im\hbar(\boldsymbol{r}_2 - \boldsymbol{r}_1)^2}{2(t_2 - t_1)}\right].$$

Амплитуда перехода $K_0(\boldsymbol{r}_2, t_2; \boldsymbol{r}_1, t_1)$ или в более краткой записи $K_0$ (2,1) обладает следующими важными свойствами:

1. Амплитуда перехода зависит только от разности $t_2 - t_1$, как это видно из формулы (29, 10),

$$K_0(\boldsymbol{r}_2,\ t_2;\ \boldsymbol{r}_1,\ t_1) = K_0(\boldsymbol{r}_2,\ \boldsymbol{r}_1,\ t_2 - t_1);$$

2. Исходя из первого свойства амплитуду перехода $K_0(\boldsymbol{r}_3, t_3; \boldsymbol{r}_1, t_1) = K_0(\boldsymbol{r}_3, \boldsymbol{r}_1, t_3 - t_1)$ можно представить в виде

$$K_0(\boldsymbol{r}_3,\ \boldsymbol{r}_1,\ t_3 - t_1) = \int K_0(\boldsymbol{r}_3,\ \boldsymbol{r}_2,\ t_3 - t_2) K_0(\boldsymbol{r}_2,\ \boldsymbol{r}_1,\ t_2 - t_1)\, d\boldsymbol{r}_2. \quad (29{,}11)$$

Это означает, что переход можно рассматривать как совокупность последовательных переходов $(1 \to 2)$, $(2 \to 3)$ по всевозможным положениям 2.

Формула (29,11) выражает принцип суперпозиции. Доказательство ее элементарно:

$$\psi(\boldsymbol{r}_3,\ t_3) = \int K_0(\boldsymbol{r}_3,\ \boldsymbol{r}_2,\ t_3 - t_2)\, \psi(\boldsymbol{r}_2,\ t_2)\, d\boldsymbol{r}_2 = \\ = \int\int K_0(\boldsymbol{r}_3,\ \boldsymbol{r}_2,\ t_3 - t_2) K_0(\boldsymbol{r}_2,\ \boldsymbol{r}_1,\ t_2 - t_1)\, \psi(\boldsymbol{r}_1,\ t_1)\, d\boldsymbol{r}_2\, d\boldsymbol{r}_1.$$

Но

$$\psi(\boldsymbol{r}_3,\ t_3) = \int K_0(\boldsymbol{r}_3,\ \boldsymbol{r}_1,\ t_3 - t_1)\, \psi(\boldsymbol{r}_1,\ t_1)\, d\boldsymbol{r}_1.$$

Сравнение этих формул сразу дает (29,11).

3. Фурье-компонента амплитуды перехода $K_0$ определяет спектр собственных значений энергии системы. Действительно, найдем фурье-компоненту функции $K_0(\boldsymbol{r}_2, \boldsymbol{r}_1, t_2 - t_1)$:

$$K_0(\boldsymbol{r}_2, \boldsymbol{r}_1, \omega) = \int K_0(\boldsymbol{r}_2, \boldsymbol{r}_1, t_2 - t_1) \exp[i\omega(t_2 - t_1)]\, d(t_2 - t_1) =$$
$$= \sum u_n(\boldsymbol{r}_2) u_n^*(\boldsymbol{r}_1) \int \exp[-i/\hbar E_n(t_2 - t_1)] \exp[i\omega(t_2 - t_1)] \times$$
$$\times\, \theta(t_2 - t_1)\, d(t_2 - t_1) = \sum u_n(\boldsymbol{r}_2) u_n^*(\boldsymbol{r}_1) I,$$

где обозначено:

$$I = \int \theta(t_2 - t_1) \exp\left[-\frac{i}{\hbar} E_n(t_2 - t_1)\right] \exp[i\omega(t_2 - t_1)]\, d(t_2 - t_1);$$

$\theta$-функция может быть представлена в виде контурного интеграла

$$\theta(x) = \lim_{\gamma \to 0} \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{i\alpha x}}{\alpha - i\gamma}\, d\alpha. \qquad (29{,}12)$$

При этом для $I$ находим

$$I = \lim_{\gamma \to 0} \frac{1}{2\pi i} \int \frac{d\alpha}{\alpha - i\gamma} \int \exp[-i(\omega_n - \omega - \alpha)\tau]\, d\tau =$$
$$= \lim_{\gamma \to 0} \frac{1}{i} \int \frac{d\alpha}{\alpha - i\gamma} \delta(\omega_n - \omega - \alpha) = \lim_{\gamma \to 0} \frac{i}{\omega - \omega_n - i\gamma}. \qquad (29{,}13)$$

Отсюда для $K_0(\boldsymbol{r}_2, \boldsymbol{r}_1, \omega)$ получаем

$$K_0(\boldsymbol{r}_2, \boldsymbol{r}_1, \omega) = \lim_{\gamma \to 0} \sum u_n^*(\boldsymbol{r}_1) u_n(\boldsymbol{r}_2) \frac{1}{\omega - \frac{E_n}{\hbar} - i\gamma}. \qquad (29{,}14)$$

Мы видим, что собственным значениям энергии $E_n$ отвечают полюса фурье-компоненты амплитуды перехода $\omega = E_n/\hbar$.

Таким образом, зная амплитуду перехода $K_0$, можно непосредственно найти спектр энергий $E_n$.

Вернемся к общему случаю оператора Гамильтона, зависящего от времени. Обычно его можно представить в виде суммы

$$\hat{H} = \hat{H}_0(\boldsymbol{r}) + U(\boldsymbol{r}, t),$$

где $\hat{H}_0$ не зависит от времени. Часто $U(\boldsymbol{r}, t)$ представляет переменное внешнее поле, действующее на частицу. В этом случае функция Грина $K$ удовлетворяет уравнению

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t_2} - \hat{H}_0 - U\right) K(2, 1) = i\hbar\, \delta(t_2 - t_1)\, \delta(\boldsymbol{r}_2 - \boldsymbol{r}_1) \qquad (29{,}15)$$

и обращается в нуль при $t_2 < t_1$;

$$K(2,\ 1) = 0 \quad \text{при } t_2 < t_1. \tag{29,16}$$

Дифференциальному уравнению (29,15) для функции Грина можно сопоставить интегральное уравнение

$$K(2,\ 1) = K_0(2,\ 1) - \frac{i}{\hbar}\int K_0(2,\ 3)\, U(3)\, K(3,\ 1)\, d^4x_3, \tag{29,17}$$

где $d^4x = dx\, dy\, dz\, dt$.

В интегральном уравнении $K_0(2, 1)$ считается известной функцией, а $K_0(2, 3)\, U(3)$ является его ядром. В этом легко убедиться, действуя на уравнение (29,17) оператором $\left[i\hbar \frac{\partial}{\partial t_2} - \hat{H}_0(\boldsymbol{r}_2)\right]$. Тогда получаем, учитывая (29, 7),

$$\left[i\hbar \frac{\partial}{\partial t_2} - \hat{H}_0(\boldsymbol{r}_2)\right] K(2,\ 1) = i\hbar\delta(t_2 - t_1)\,\delta(\boldsymbol{r}_2 - \boldsymbol{r}_1) + U(2)\, K(2,\ 1).$$

Таким образом, мы снова приходим к уравнению (29,15).

Начальное условие (29,16) содержится в (29,17), поскольку

$$K_0(2,\ 1) = 0 \quad \text{при } t_2 < t_1.$$

Интегральная форма уравнения для амплитуды перехода (29,7) особенно удобна потому, что она позволяет получить $K(2, 1)$ в виде ряда последовательных приближений (см. § 58).

## § 30. Собственные значения и собственные функции операторов момента и квадрата момента

Построим теперь операторы, которые будут играть важную роль в дальнейшем изложении, — операторы проекций момента количества движения и квадрата момента количества движения. Заменяя по общему правилу в классическом определении момента количества движения механические величины квантовомеханическими операторами, находим:

$$\begin{aligned} \hat{l}_x &= y\hat{p}_z - z\hat{p}_y = \frac{\hbar}{i}\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right), \\ \hat{l}_y &= z\hat{p}_x - x\hat{p}_z = \frac{\hbar}{i}\left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right), \\ \hat{l}_z &= x\hat{p}_y - y\hat{p}_x = \frac{\hbar}{i}\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right). \end{aligned} \tag{30,1}$$

Совокупность операторов $\hat{l}_x$, $\hat{l}_y$ и $\hat{l}_z$ мы будем называть оператором момента количества движения $\hat{l}$. Последняя величина обладает всеми свойствами момента количества движения.

В частности, как мы покажем ниже, она подчиняется таким же законам сохранения, что и момент в классической механике.

Построим, далее, оператор квадрата момента количества движения

$$\hat{l}^2 = \hat{l}_x^2 + \hat{l}_y^2 + \hat{l}_z^2. \qquad (30,2)$$

Рассмотрим перестановочные соотношения для введенных операторов. Заметим прежде всего, что операторы проекций момента количества движения на разные оси координат не коммутируют между собой. Действительно, вычислим, например, коммутатор $\hat{l}_x\hat{l}_y - \hat{l}_y\hat{l}_x$. Пользуясь выражениями (30, 1), имеем

$$\hat{l}_x\hat{l}_y = -\hbar^2\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right)\left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right) =$$
$$= -\hbar^2\left(y\frac{\partial}{\partial x} + yz\frac{\partial^2}{\partial z\,\partial x} - xy\frac{\partial^2}{\partial z^2} - z^2\frac{\partial^2}{\partial y\,\partial x} + xz\frac{\partial^2}{\partial y\,\partial z}\right).$$

С другой стороны, переставляя операторы, найдем

$$\hat{l}_y\hat{l}_x = -\hbar^2\left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right)\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right) =$$
$$= -\hbar^2\left(zy\frac{\partial^2}{\partial x\,\partial z} - z^2\frac{\partial^2}{\partial x\,\partial y} - xy\frac{\partial^2}{\partial z^2} + x\frac{\partial}{\partial y} + xz\frac{\partial^2}{\partial z\partial y}\right).$$

Вычитая из верхнего равенства нижнее, окончательно получаем

$$\hat{l}_x\hat{l}_y - \hat{l}_y\hat{l}_x = \hbar^2\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right) = i\hbar\hat{l}_z. \qquad (30,3)$$

Производя циклическую перестановку координат $x$, $y$, $z$, получаем еще два равенства:

$$\begin{aligned} \hat{l}_y\hat{l}_z - \hat{l}_z\hat{l}_y &= i\hbar\hat{l}_x, \\ \hat{l}_z\hat{l}_x - \hat{l}_x\hat{l}_z &= i\hbar\hat{l}_y. \end{aligned} \qquad (30,3')$$

Из соотношений (30,3) следует, что проекции момента количества движения частицы $l_x$, $l_y$, $l_z$ не могут одновременно иметь определенные значения. Исключением является состояние, когда момент количества движения равен нулю, так как при этом $\bar{l}_x = \bar{l}_y = \bar{l}_z = 0$. В то же время операторы проекций $\hat{l}_x$, $\hat{l}_y$ и $\hat{l}_z$ коммутируют с оператором квадрата момента $\hat{l}^2$, т. е. имеют место соотношения

$$\left.\begin{aligned} \hat{l}_x\hat{l}^2 - \hat{l}^2\hat{l}_x &= 0, \\ \hat{l}_y\hat{l}^2 - \hat{l}^2\hat{l}_y &= 0, \\ \hat{l}_z\hat{l}^2 - \hat{l}^2\hat{l}_z &= 0. \end{aligned}\right\} \qquad (30,4)$$

Эти соотношения легко доказываются с помощью (30,3). Докажем, например, первое из них. Из соотношения (30,3), умножая его соответственно справа и слева на $\hat{l}_y$, имеем

$$\hat{l}_x\hat{l}_y^2 = \hat{l}_y\hat{l}_x\hat{l}_y + i\hbar\hat{l}_z\hat{l}_y,$$
$$\hat{l}_y^2\hat{l}_x = \hat{l}_y\hat{l}_x\hat{l}_y - i\hbar\hat{l}_y\hat{l}_z.$$

Вычитаем из верхнего соотношения нижнее, получаем

$$\hat{l}_x\hat{l}_y^2 - \hat{l}_y^2\hat{l}_x = i\hbar(\hat{l}_z\hat{l}_y + \hat{l}_y\hat{l}_z).$$

Аналогичным образом,

$$\hat{l}_x\hat{l}_z^2 - \hat{l}_z^2\hat{l}_x = -i\hbar(\hat{l}_z\hat{l}_y + \hat{l}_y\hat{l}_z).$$

Учитывая также, что $\hat{l}_x\hat{l}_x^2 - \hat{l}_x^2\hat{l}_x = 0$, и складывая полученные равенства, находим

$$\hat{l}_x\hat{\mathbf{l}}^2 - \hat{\mathbf{l}}^2\hat{l}_x = 0.$$

Таким же образом доказываются и два оставшиеся соотношения (30,4). Из этих соотношений следует, что квадрат полного момента количества движения и одна из его проекций на произвольную ось могут одновременно иметь определенные значения.

Заметим, что правила коммутации, аналогичные (30,3), (30,3′), справедливы также для операторов момента количества движения и координаты, момента количества движения и импульса. Опуская простое доказательство, приведем два соотношения:

$$\hat{l}_x\hat{y} - \hat{y}\hat{l}_x = i\hbar\hat{z},$$
$$\hat{l}_x\hat{p}_y - \hat{p}_y\hat{l}_x = i\hbar\hat{p}_z. \tag{30,5}$$

Остальные четыре равенства получаются циклической перестановкой индексов. Соотношения (30,3), (30,4), (30,5) совпадают с соответствующими классическими выражениями при условии, конечно, что мы от коммутаторов перейдем к классическим скобкам Пуассона.

Определим, далее, возможные значения проекции момента количества движения на произвольно выбранное направление в пространстве и возможные значения квадрата момента (т. е. собственные значения этих операторов). При решении соответствующих уравнений для собственных функций и собственных значений удобно перейти к сферической системе координат.

Переход от декартовых координат $x$, $y$, $z$ к переменным $r$, $\theta$, $\varphi$ в формулах (30,1), (30,2) производим по обычным правилам замены переменных. Опуская эти элементарные

вычисления, приведем результат:

$$\hat{l}_z = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\varphi}, \tag{30,6}$$

$$\hat{l}_x = \frac{\hbar}{i}\left(\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\vartheta} + \operatorname{ctg}\vartheta\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right), \tag{30,7}$$

$$\hat{l}_y = \frac{\hbar}{i}\left(\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\vartheta} - \operatorname{ctg}\vartheta\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right), \tag{30,8}$$

$$\hat{l}^2 = -\hbar^2\left[\frac{1}{\sin\vartheta}\frac{\partial}{\partial\vartheta}\left(\sin\vartheta\frac{\partial}{\partial\vartheta}\right) + \frac{1}{\sin^2\vartheta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right] = -\hbar^2\Delta_{\vartheta,\varphi}, \tag{30,9}$$

где $\Delta_{\vartheta,\varphi}$ — угловая часть оператора Лапласа, взятого в сферической системе координат.

Выбрав за ось $z$ некоторое произвольное направление в пространстве, определим собственные функции и собственные значения оператора проекции момента на это направление. Уравнение для собственных функций и собственных значений оператора $\hat{l}_z$ имеет вид

$$\frac{\hbar}{i}\frac{\partial\psi}{\partial\varphi} = l_z\psi. \tag{30,10}$$

Решением этого уравнения служит

$$\psi = \psi(r, \vartheta)e^{\frac{il_z}{\hbar}\varphi}, \tag{30,11}$$

где $\psi(r, \vartheta)$ — произвольная функция.

Волновая функция, являющаяся решением уравнения (30,10), должна удовлетворять условию однозначности. Поскольку $\varphi$ — циклическая переменная, изменяющаяся от 0 до $2\pi$, условие однозначности запишется в виде

$$\psi(\varphi) = \psi(\varphi + 2\pi)$$

или

$$e^{\frac{i}{\hbar}l_z\varphi} = e^{\frac{i}{\hbar}l_z(\varphi+2\pi)}.$$

Последнее условие выполняется, если $l_z = m\hbar$, где $m$ — целое положительное или отрицательное число (включая и нуль). В дальнейшем оно будет называться магнитным квантовым числом.

Так как ось $z$ не выделена какими-либо физическими условиями, тот же результат имеет место и для операторов $\hat{l}_x$ и $\hat{l}_y$.

Таким образом, проекция момента на произвольно выделенное направление в пространстве принимает целочисленные (в единицах $\hbar$) значения. При определенном значении проекции $l_z$ две другие проекции момента не имеют никакого определенного значения. Это означает, что если в состоянии с заданным $l_z$ производить измерения значений проекций $l_x$ и $l_y$, то для последних может быть найдено любое возможное значение.

Собственная функция оператора $\hat{l}_z$, зависящая от угла $\varphi$ и нормированная на единицу условием

$$\int_0^{2\pi} \psi_m^*(\varphi)\,\psi_{m'}(\varphi)\,d\varphi = \delta_{mm'},$$

имеет вид

$$\psi_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\,e^{im\varphi}. \tag{30,12}$$

Определим теперь собственные значения и собственные функции оператора квадрата момента $\hat{l}^2$

$$\hat{l}^2\psi = l^2\psi. \tag{30,13}$$

Подставляя в (30, 13) выражение для $\hat{l}^2$, даваемое формулой (30, 9), получаем уравнение

$$\frac{1}{\sin\vartheta}\frac{\partial}{\partial\vartheta}\left(\sin\vartheta\,\frac{\partial\psi}{\partial\vartheta}\right) + \frac{1}{\sin^2\vartheta}\frac{\partial^2\psi}{\partial\varphi^2} + \frac{l^2}{\hbar^2}\psi = 0. \tag{30,14}$$

Уравнение для собственных функций оператора $\hat{l}^2$ является широко известным уравнением для сферических функций [1]).

Уравнение (30,14) имеет решения, удовлетворяющие стандартным условиям, сформулированным в § 16 только при значениях $\frac{l^2}{\hbar^2} = l(l+1)$, где $l$ — целое положительное число (включая и нуль). Квантовое число $l$ получило название азимутального квантового числа. Таким образом, оператор квадрата момента имеет дискретный спектр собственных значений

$$l^2 = \hbar^2 l(l+1). \tag{30,15}$$

Решение уравнения (30,14) для собственных функций оператора квадрата момента имеет вид

$$\psi_{lm}(\vartheta,\ \varphi) = Y_{lm}(\vartheta,\ \varphi) = (-1)^k\sqrt{\frac{(l-|m|)!\,(2l+1)}{(l+|m|)!\,4\pi}}\;P_l^m(\cos\vartheta)\,e^{im\varphi}, \tag{30,16}$$

где $m$ — целое число, принимающее значения $m = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots$ $\ldots, \pm l$; $k = m$ при $m \geqslant 0$ и $k = 0$ при $m < 0$.

Через $P_l^m$ мы обозначили присоединенный полином Лежандра

$$P_l^m = (1-\xi^2)^{\frac{|m|}{2}}\frac{d^{|m|}}{d\xi^{|m|}}P_l(\xi) = \frac{1}{2^l l!}(1-\xi^2)^{\frac{|m|}{2}}\frac{d^{|m|+l}}{d\xi^{|m|+l}}(\xi^2-1)^l. \tag{30,17}$$

---

[1]) См., например, В. И. Смирнов, Курс высшей математики, т. III, ч. 2, Физматгиз, 1956, стр. 499; В. А. Фок, Начала квантовой механики, Кубуч, 1932, стр. 118.

Постоянный множитель в формуле (30,16) определяется из условия нормировки функций $Y_{lm}$ на единицу

$$\int_0^{\pi}\int_0^{2\pi} Y^*_{lm}(\vartheta,\ \varphi)\, Y_{l'm'}(\vartheta,\ \varphi)\sin\vartheta\, d\vartheta\, d\varphi = \delta_{ll'}\delta_{mm'}. \qquad (30,18)$$

Из формул (30,15) и (30,16) следует, что каждому собственному значению квадрата момента отвечает $(2l+1)$ собственных функций $Y_{lm}$ (отличающихся числом $m$). Таким образом, собственные значения квадрата момента являются вырожденными. Смысл указанного вырождения, а следовательно числа $m$, легко понять. Подействуем на волновую функцию $Y_{lm}$ оператором $\hat{l}_z$. Тогда получим

$$\hat{l}_z Y_{lm}(\vartheta,\ \varphi) = \hbar m Y_{lm}(\vartheta,\ \varphi). \qquad (30,19)$$

Мы видим, что волновая функция $Y_{lm}$ является одновременно собственной функцией операторов $\hat{l}_z$ и $\hat{l}^2$. Отсюда ясно, что квантовое число $m$, входящее в (30,16), характеризует величину проекции момента на ось $z$ в данном состоянии, а волновая функция $Y_{lm}$ описывает состояние с заданным полным моментом и его проекцией на ось $z$.

Резюмируя, мы можем сказать, что величина квадрата полного момента количества движения определяется по формуле (30,15) азимутальным квантовым числом $l$, пробегающим ряд целочисленных значений. При фиксированном значении квадрата момента проекция момента на произвольно ориентированную ось $z$ может принимать $(2l+1)$ значений, от $-l$ до $+l$ (в единицах $\hbar$). Никакие другие значения проекции момента при заданном $l$ невозможны. Так как ось $z$ ориентирована совершенно произвольно, то, естественно, и проекции момента на оси $x$ и $y$ при заданном $l$ также принимают значения от $-l$ до $+l$. При $l=0$ проекция момента на любую ось также равна нулю. Это есть единственное состояние, когда проекции момента на разные оси одновременно имеют определенное значение. Волновая функция $Y_{lm}$ при этом $(l=0)$ сводится к постоянной, которая является собственной функцией всех операторов $\hat{l}_x$, $\hat{l}_y$, $\hat{l}_z$.

Заметим, что собственное значение квадрата полного момента $l^2 = \hbar^2 l(l+1)$ всегда больше квадрата максимальной проекции момента, равной $\hbar^2 l^2$. Если бы эти величины совпадали, то это означало бы, что в состоянии, в котором проекция момента на некоторую ось имеет максимальное значение, две другие проекции равны нулю. Последнее, однако, невозможно, так как при определенном значении одной из проекций момента две

другие не могут иметь никаких определенных значений, хотя бы и нулевых.

Покажем, наконец, что оператор момента количества движения связан с оператором бесконечно малого поворота системы вокруг начала координат. Действительно, повернем систему координат на малый угол $\delta\varphi$, например вокруг оси $z$. Старые и новые координаты точки связаны соотношениями

$$x' = x + y\,\delta\varphi, \qquad x = x' - y'\,\delta\varphi,$$
$$y' = -x\,\delta\varphi + y, \qquad y = x'\,\delta\varphi + y',$$
$$z' = z, \qquad z = z'.$$

Следовательно, при повороте волновая функция $\psi(x, y, z)$, выраженная через новые переменные, имеет вид

$$\psi(x,\ y,\ z) = \psi(x' - y'\,\delta\varphi,\ y' + x'\,\delta\varphi,\ z') =$$
$$= \psi(x',\ y',\ z') - y'\,\delta\varphi\frac{\partial\psi}{\partial x'} + x'\,\delta\varphi\frac{\partial\psi}{\partial y'} =$$
$$= \left[1 + \delta\varphi\left(x'\frac{\partial}{\partial y'} - y'\frac{\partial}{\partial x'}\right)\right]\psi(x',\ y',\ z') =$$
$$= \left(1 + \frac{i}{\hbar}\,\delta\varphi\hat{l}_{z'}\right)\psi(x',\ y',\ z') = \hat{W}_{z'}\psi(x',\ y',\ z').$$

Оператор $\hat{W}$ естественно назвать оператором поворота. Мы нашли, что оператор $\hat{W}_z$ поворота на малый угол $\delta\varphi$ вокруг оси $z$ связан с оператором $\hat{l}_z$ соотношением

$$\hat{W}_z = 1 + \frac{i}{\hbar}\,\delta\varphi\hat{l}_z. \tag{30,20}$$

Такая же связь, конечно, имеет место и для любой другой оси.

## § 31. Дифференцирование операторов по времени

Построим теперь оператор $\hat{\dot{F}}$, отвечающий производной по времени от квантовомеханической величины, описываемой оператором $\hat{F}$. Совершенно ясно, что обычное определение производной от функции неприменимо к квантовомеханической величине, описываемой оператором $\hat{F}$. Для определения понятия производной мы вновь воспользуемся аналогией с классической механикой. Как известно, в классической механике производная по времени от некоторой механической величины $F$ может быть выражена через классическую скобку Пуассона

$$\frac{dF}{dt} = \frac{\partial F}{\partial t} + [H,\ F],$$

где $H$ — функция Гамильтона.

Переходя от классических величин к квантовомеханическим операторам и от классической скобки Пуассона к квантовой, получим выражение для оператора $\hat{\dot{F}}$

$$\hat{\dot{F}} = \frac{\partial \hat{F}}{\partial t} + [\hat{H}, \hat{F}]. \tag{31,1}$$

Если оператор $\hat{F}$ не зависит от времени явно, то оператор $\hat{\dot{F}}$ имеет вид

$$\hat{\dot{F}} = [\hat{H}, \hat{F}] = \frac{i}{\hbar}(\hat{H}\hat{F} - \hat{F}\hat{H}). \tag{31,2}$$

Из свойств квантовых скобок Пуассона сразу следуют выражения для производной от суммы $\hat{F}$ и произведения $\hat{L}$ двух операторов $\hat{D}$ и $\hat{R}$

$$\hat{\dot{F}} = \hat{\dot{D}} + \hat{\dot{R}}, \tag{31,3}$$

$$\hat{\dot{L}} = \hat{\dot{D}}\hat{R} + \hat{D}\hat{\dot{R}}.$$

С помощью формулы (31,1) для производной от квантового оператора можно найти выражение для производной по времени от среднего значения величины $F$.

Дифференцируя выражение (22, 4) для среднего, находим

$$\dot{\bar{F}} = \int \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \hat{F}\psi \, dV + \int \psi^* \frac{\partial \hat{F}}{\partial t} \psi \, dV + \int \psi^* \hat{F} \frac{\partial \psi}{\partial t} \, dV.$$

Выразим производные $\frac{\partial \psi}{\partial t}$ и $\frac{\partial \psi^*}{\partial t}$ через волновые функции с помощью уравнения Шредингера и уравнения с ним сопряженного. Тогда имеем

$$\dot{\bar{F}} = \int \psi^* \frac{\partial \hat{F}}{\partial t} \psi \, dV - \frac{i}{\hbar} \int \psi^* \hat{F}(\hat{H}\psi) \, dV + \frac{i}{\hbar} \int (\hat{H}^*\psi^*) \hat{F}\psi \, dV,$$

$$\int (\hat{H}^*\psi^*) \hat{F}\psi \, dV = \int (\hat{F}\psi) \hat{H}^*\psi^* \, dV,$$

так как интеграл не изменяется при перестановке подынтегральных функций.

Из эрмитовости оператора $\hat{H}$ следует, что

$$\int (\hat{F}\psi) \hat{H}^*\psi^* \, dV = \int \psi^* \hat{H}\hat{F}\psi \, dV.$$

Окончательно получаем

$$\dot{\bar{F}} = \int \psi^* \left( \frac{\partial \hat{F}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar}(\hat{H}\hat{F} - \hat{F}\hat{H}) \right) \psi \, dV. \tag{31,4}$$

Сравнивая полученное выражение с определением среднего от производной $\dot{F}$, мы приходим к важному равенству

$$\overline{\dot{F}} = \overline{\dot{F}}. \qquad (31,5)$$

В виде примера определим операторы $\hat{\dot{x}}$ и $\hat{\dot{p}}_x$. Поскольку операторы координаты и импульса явно от времени не зависят, имеем

$$\begin{aligned} \hat{\dot{x}} &= [\hat{H}, \hat{x}], \\ \hat{\dot{p}}_x &= [\hat{H}, \hat{p}_x]. \end{aligned} \qquad (31,6)$$

В такой форме операторные уравнения (31,6) аналогичны классическим уравнениям Гамильтона. Раскроем коммутаторы, стоящие в правых частях равенств (31,6), предполагая при этом, что гамильтониан имеет вид

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}(\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2) + U(x, y, z, t).$$

Учитывая, что операторы координаты и импульса равны

$$\hat{x} = x, \quad \hat{p}_x = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x},$$

получаем

$$[\hat{H}, \hat{x}] = \frac{i}{2m\hbar}(\hat{p}_x^2 x - x\hat{p}_x^2),$$

поскольку $x$ и $U(x, y, z, t)$ коммутируют.

Вычисляя коммутатор операторов $\hat{p}_x^2$ и $x$, найдем

$$\hat{p}_x^2 x - x\hat{p}_x^2 = -\hbar^2\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}x - x\frac{\partial^2}{\partial x^2}\right) = -\hbar^2\left(x\frac{\partial^2}{\partial x^2} + 2\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial x^2}\right) =$$
$$= -2\hbar^2\frac{\partial}{\partial x} = -2i\hbar\hat{p}_x.$$

Окончательно получаем:

$$\hat{\dot{x}} = [\hat{H}, \hat{x}] = \frac{1}{m}\hat{p}_x. \qquad (31,7)$$

Мы видим, что оператор скорости $\hat{\dot{x}}$ связан с оператором импульса $p_x$ таким же соотношением, каким в классической механике связаны между собой эти величины. Найдем оператор $\hat{\dot{p}}_x$

$$[\hat{H}, \hat{p}_x] = \frac{i}{\hbar}(U\hat{p}_x - \hat{p}_x U) = -\frac{\partial U}{\partial x}.$$

Итак, имеем

$$\hat{\dot{p}}_x = -\frac{\partial U}{\partial x}. \qquad (31,8)$$

Мы получили операторное уравнение движения в форме уравнения Ньютона. Уравнения (31,7), (31,8) можно написать также для средних значений соответствующих величин

$$\dot{\bar{x}} = \bar{\dot{x}} = \frac{1}{m}\bar{p}_x, \quad \dot{\bar{p}}_x = \bar{\dot{p}}_x = -\frac{\overline{\partial U}}{\partial x}. \tag{31,9}$$

Последние соотношения носят название теорем Эренфеста. Выражая $\dot{\bar{p}}_x$ через $\ddot{\bar{x}}$, находим

$$m\ddot{\bar{x}} = -\frac{\overline{\partial U}}{\partial x}. \tag{31,10}$$

В такой форме это уравнение очень близко по внешнему виду к уравнению Ньютона классической механики.

## § 32. Интегралы движения

Предположим, что оператор $\hat{F}$ не зависит от времени явно и коммутирует с оператором Гамильтона $\hat{H}$. В этом случае, согласно (31,2) оператор производной по времени равен нулю, и из соотношения (31,5) вытекает, что среднее значение величины $F$ не изменяется во времени

$$\dot{\bar{F}} = 0. \tag{32,1}$$

Постоянна во времени также вероятность того, что при измерении $F$ мы получим какое-то возможное значение $F_n$ этой величины. Действительно, эта вероятность дается квадратом модуля $|c_n(t)|^2$ коэффициента разложения волновой функции $\psi(x, t)$, описывающей состояние системы в момент времени $t$, по собственным функциям оператора $\hat{F}$. Поскольку, однако, оператор $\hat{F}$ коммутирует с оператором $\hat{H}$, оба оператора имеют общие собственные функции $\psi_n(x, t) = \psi_n(x)e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}$ (см. § 23). Разложение $\psi(x, t)$ по собственным функциям оператора $\hat{F}$ можно представить в виде

$$\psi(x, t) = \sum_n c_n(0)e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}\psi_n(x) = \sum_n c_n(t)\psi_n(x). \tag{32,2}$$

Следовательно,

$$|c_n(t)|^2 = |c_n(0)|^2 = \text{const}.$$

Такие величины в квантовой механике, так же как и в механике классической, принято именовать интегралами движения. Из сказанного ясно, что квантовомеханическая величина является интегралом движения, если:

1) ее оператор не зависит от времени явно;

2) этот оператор коммутирует с оператором Гамильтона.

Зная операторы различных квантовомеханических величин и оператор Гамильтона, можно найти законы сохранения.

Нахождение законов сохранения в квантовой механике столь же существенно для исследования движения системы, как и в классической механике. Как и в классической механике[1]), законы сохранения импульса и момента количества движения тесно связаны со свойствами однородности и изотропии пространства. Так, из изотропии пространства следует, что гамильтониан замкнутой системы или системы в поле сил с центральной симметрией не должен изменяться при произвольном бесконечно малом повороте. Математически это выражается в том, что гамильтониан $\hat{H}$ должен коммутировать с оператором поворота $\hat{W}$. Но оператор поворота на малый угол вокруг некоторой оси (например оси $z$), как мы знаем (см. § 30), связан простым образом с оператором проекции момента количества движения на эту ось. Поэтому следствием коммутации оператора $\hat{W}_z$ с гамильтонианом $\hat{H}$ является коммутация с гамильтонианом оператора $\hat{l}_z$, откуда и вытекает закон сохранения этой величины. То обстоятельство, что мы рассматривали поворот лишь на малый угол, несущественно, поскольку поворот на конечный угол можно разбить на совокупность малых поворотов.

Итак, мы видим, что сохранение момента количества движения связано с изотропией пространства.

Аналогичным образом легко видеть, что сохранение импульса связано с однородностью пространства. Действительно, из однородности пространства следует, что оператор сдвига не должен изменять гамильтониан замкнутой системы, т. е. должен коммутировать с ним. Но так как оператор сдвига $\hat{R}$ связан с оператором соответствующей проекции импульса (см. § 26), то мы сразу приходим к закону сохранения импульса.

Закон сохранения энергии замкнутой системы или системы в стационарных внешних полях можно связать с произвольностью выбора начала отсчета времени (однородность во времени). Это означает, что законы движения системы не должны зависеть от выбора начала отсчета времени.

Введем оператор трансляции на малый интервал времени $\delta t$, $\hat{\mathscr{V}}(\delta t)$, определяемый соотношением

$$\hat{\mathscr{V}}(\delta t)\,\psi(x,\ t)=\psi(x,\ t+\delta t). \qquad (32,3)$$

---

[1]) См., например, Л. Д. Ландау и Е. М. Лифшиц, Механика, Физматгиз, 1958, стр. 23.

Раскладывая функцию $\psi(x, t+\delta t)$ в ряд по малому интервалу $\delta t$ и ограничиваясь членами первого порядка малости, получим

$$\hat{\mathscr{V}}(\delta t)\,\psi(x,\ t) = \left(1 + \delta t\frac{\partial}{\partial t}\right)\psi(x,\ t).$$

Отсюда следует, что оператор $\hat{\mathscr{V}}(\delta t)$ имеет вид

$$\hat{\mathscr{V}}(\delta t) = 1 + \delta t\frac{\partial}{\partial t}. \tag{32,4}$$

Требование независимости законов движения системы от выбора начала отсчета времени выражается коммутацией оператора $\hat{\mathscr{V}}(\delta t)$ с гамильтонианом системы

$$\hat{\mathscr{V}}(\delta t)\,\hat{H} = \hat{H}\hat{\mathscr{V}}(\delta t). \tag{32,5}$$

Используя для $\hat{\mathscr{V}}(\delta t)$ выражение (32,4), мы можем переписать соотношение (32, 5) в виде

$$\frac{\partial\hat{H}}{\partial t} = 0. \tag{32,6}$$

Но равенство (32,6) и выражает закон сохранения энергии. Действительно, оператор $\hat{H}$ заведомо коммутирует сам с собой и условие $\hat{\dot{H}} = 0$, означающее закон сохранения энергии, сводится к (32,6).

Существованию интеграла движения отвечает простое свойство волновой функции. Если оператор $\hat{I}$ отвечает некоторой сохраняющейся величине, то наряду с волновой функцией $\psi$ уравнению Шредингера будет удовлетворять и волновая функция

$$\psi' = e^{i\alpha\hat{I}}\psi, \tag{32,7}$$

где $\alpha$ — произвольное вещественное число, а оператор $e^{i\alpha\hat{I}}$ понимается в смысле разложения в степенной ряд

$$e^{i\alpha\hat{I}} = 1 + i\alpha\hat{I} + \frac{(i\alpha)^2}{2}\hat{I}^2 + \ldots$$

Действительно, подставляя $\psi'$ в уравнение Шредингера, находим

$$i\hbar\frac{\partial\psi'}{\partial t} = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\,e^{i\alpha\hat{I}}\psi = \hat{H}e^{i\alpha\hat{I}}\,\psi. \tag{32,8}$$

Но поскольку $\hat{I}$, как оператор сохраняющейся величины, удовлетворяет условию коммутации

$$\hat{I}\,\hat{H} - \hat{H}\hat{I} = 0, \qquad \frac{\partial I}{\partial t} = 0,$$

имеем

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(e^{i\alpha\hat{I}}\psi\right)=e^{i\alpha\hat{I}}\frac{\partial\psi}{\partial t},\qquad \hat{H}e^{i\alpha\hat{I}}\psi=e^{i\alpha\hat{I}}\hat{H}\psi$$

и уравнение (32,8) удовлетворяется непосредственно.

Рассмотрим некоторые простые примеры. Начнем со случая свободной частицы. Гамильтониан при этом будет иметь вид

$$\hat{H}=\frac{1}{2m}\left(\hat{p}_x^2+\hat{p}_y^2+\hat{p}_z^2\right).$$

Очевидно, что

$$[\hat{H},\ \hat{p}_x]=[\hat{H},\ \hat{p}_y]=[\hat{H},\ \hat{p}_z]=0.$$

Следовательно,

$$\dot{\hat{p}}_x=\dot{\hat{p}}_y=\dot{\hat{p}}_z=0. \qquad (32,7)$$

Если свободная частица в какой-то начальный момент находилась в состоянии с заданным импульсом, то это значение импульса сохраняется во времени.

В качестве другого примера рассмотрим частицу, движущуюся в поле, создаваемом бесконечной однородной плоскостью (плоскость $xy$). Потенциальная энергия частицы в таком поле зависит только от расстояния до плоскости $U=U(|z|)$, так что гамильтониан имеет вид

$$\hat{H}=-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta+U(|z|).$$

С таким гамильтонианом коммутируют операторы $\hat{p}_x$, $\hat{p}_y$, $\hat{l}_z$. Это означает, что при движении в поле однородной плоскости ($xy$) сохраняются компоненты импульса частицы $p_x$ и $p_y$ и $z$-я компонента момента количества движения $l_z$.

## § 33. Четность

Рассмотренные выше законы сохранения — закон сохранения энергии, импульса и момента количества движения являются квантовомеханическими аналогами законов сохранения классической механики. Оказывается, однако, что в квантовой механике существуют и законы сохранения, не имеющие классического аналога. Один из таких законов тесно связан со свойствами пространства и имеет весьма общий характер. Именно, гамильтониан замкнутой системы не должен изменяться при следующих преобразованиях координат:

1) трансляции начала координат на произвольный отрезок;

2) повороте на произвольный угол;

3) преобразовании инверсии в начале координат, т. е. замене $x_i\to -x_i$, при которой знаки всех координат изменяются на обратные.

С первыми двумя преобразованиями, как мы видели в предыдущем параграфе, были связаны закон сохранения импульса и момента количества движения. С преобразованием инверсии в квантовой механике оказывается связанным еще один общий закон сохранения. Подобно введенным ранее операторам переноса и поворота можно ввести и соответствующий оператор инверсии $\hat{I}$

$$\hat{I}\psi(\boldsymbol{r}, t) = a\psi(-\boldsymbol{r}, t), \tag{33,1}$$

где $a$ — некоторая постоянная.

При двухкратном применении оператора инверсии $\hat{I}$ мы приходим к исходному состоянию. Отсюда следует, что $a^2 = 1$, т. е. $a = \pm 1$. Таким образом, вообще, выполняется условие

$$\hat{I}\psi(\boldsymbol{r}, t) = \pm\psi(-\boldsymbol{r}, t), \tag{33,2}$$

т. е. при инверсии может менять знак непосредственно сама волновая функция, а не только аргумент $\boldsymbol{r}$, от которого она зависит. Свойство волновой функции преобразовываться при инверсии с $a = +1$ или $a = -1$ зависит от внутренних свойств частиц, описываемых этой волновой функцией.

О частицах, которые описываются волновыми функциями, удовлетворяющими условию

$$\hat{I}\psi(\boldsymbol{r}, t) = \psi(-\boldsymbol{r}, t),$$

говорят, что они обладают положительной внутренней четностью. Наоборот, частицы, которые описываются волновыми функциями, удовлетворяющими условию

$$\hat{I}\psi(\boldsymbol{r}, t) = -\psi(-\boldsymbol{r}, t),$$

имеют отрицательную внутреннюю четность.

Предположим, что гамильтониан замкнутой системы имеет вид

$$\hat{H} = \sum_i -\frac{\hbar^2}{2m_i}\Delta_i + \frac{1}{2}\sum_{i \neq k} U_{ik}(|\boldsymbol{r}_i - \boldsymbol{r}_k|).$$

Легко видеть, что этот гамильтониан не изменяется при замене $\boldsymbol{r}_i \to -\boldsymbol{r}_i$, т. е. он удовлетворяет условию

$$\hat{I}\hat{H}\psi = \hat{H}\hat{I}\psi.$$

Это означает, что оператор $\hat{I}$ коммутирует с гамильтонианом

$$\hat{I}\hat{H} = \hat{H}\hat{I}. \tag{33,3}$$

Определим собственные значения $\lambda$ оператора инверсии

$$\hat{I}\psi_\lambda(x) = \lambda\psi_\lambda(x). \tag{33,4}$$

Применим к этому уравнению оператор инверсии еще раз. Так как при двукратном отражении мы возвращаемся к исходному значению координат, то это преобразование является тождественным

$$\hat{I}^2\psi_\lambda = \psi_\lambda = \lambda\hat{I}\psi_\lambda = \lambda^2\psi_\lambda. \qquad (33,5)$$

Отсюда получаем, что собственные значения $\lambda$ равны $\pm 1$. О состоянии, которому отвечает $\lambda = +1$, говорят, что оно имеет положительную четность или является четным. Наоборот, состояние с $\lambda = -1$ имеет отрицательную четность или является нечетным. Если оператор четности коммутирует с оператором Гамильтона, то имеет место закон сохранения четности. Закон сохранения четности, как и другие законы сохранения, накладывает определенные ограничения на возможные изменения состояний системы. Именно, если система была в четном состоянии, то она будет оставаться в этом состоянии, не переходя в нечетное состояние. Аналогично дело обстоит, естественно, и с системой, находящейся в нечетном состоянии.

Определим четность состояния частицы с моментом количества движения, равным $l$. То обстоятельство, что момент количества движения и четность могут быть определены одновременно, следует из коммутации соответствующих операторов:

$$\{\hat{I}, \hat{l}_x\} = 0; \quad \{\hat{I}, \hat{l}_y\} = 0; \quad \{\hat{I}, \hat{l}_z\} = 0; \quad \{\hat{I}, \hat{l}^2\} = 0. \qquad (33,6)$$

Из самих выражений для операторов момента $\hat{l}_x$, $\hat{l}_y$, $\hat{l}_z$ ясно, что они не изменяются при преобразовании инверсии. В сферической системе координат преобразование инверсии имеет вид

$$r \to r; \quad \vartheta \to \pi - \vartheta; \quad \varphi \to \varphi + \pi. \qquad (33,7)$$

Зависимость волновой функции частицы с определенным моментом $l$ от углов $\vartheta$, $\varphi$ дается сферической функцией $Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$ (см. § 30). При преобразовании инверсии (33,7) имеем $\cos\vartheta \to -\cos\vartheta$ и $e^{im\varphi} \to (-1)^m e^{im\varphi}$. Как преобразуется присоединенный полином Лежандра $P_l^m(\xi)$ при изменении знака его аргумента, легко определить из формулы (30,17). Так как $P_l(-\xi) = (-1)^l P_l(\xi)$, то мы получаем, что $P_l^m(-\xi) = (-1)^{l+m} P_l^m(\xi)$. Учитывая также множитель $(-1)^m$, который дает функция $e^{im\varphi}$, находим, что при инверсии волновая функция в целом умножается на множитель $(-1)^l$. Принимая во внимание также множитель $a = \pm 1$, связанный с внутренними свойствами частиц, получаем:

$$\lambda = (-1)^l a. \qquad (33,8)$$

Таким образом, состояния с четными $l$ имеют положительную четность, если $a = 1$, и отрицательную, если $a = -1$. Состояния

с нечетными $l$ имеют соответственно отрицательную четность при $a = 1$ и положительную, если $a = -1$. Если мы имеем систему невзаимодействующих частиц, то четность системы определяется произведением четностей отдельных частиц. Действительно, в § 14 мы видели, что волновая функция системы невзаимодействующих частиц может быть записана в виде произведения волновых функций отдельных частиц. Но отсюда сразу следует, что при преобразовании инверсии четности, относящиеся к отдельным частицам, перемножаются. Если каждая из частиц находится в состоянии с определенным моментом количества движения (движение в центральном поле), то четность всей системы может быть записана в виде

$$\lambda = (-1)^{\Sigma l_k} \prod_k a_k, \tag{33,9}$$

где второй множитель определяется произведением внутренних четностей частиц.

Наряду с другими законами сохранения закон сохранения четности является одним из наиболее общих законов природы. Невозможность переходов замкнутой квантовомеханической системы из состояний с одной четностью в состояния с другой четностью — так называемых запрещенных переходов, подтверждается обширным экспериментальным материалом как атомной, так и ядерной физики. Однако в последнее время (см. § 122) было установлено, что закон сохранения четности не является универсальным физическим законом. При некоторых процессах, происходящих с элементарными частицами, закон сохранения четности нарушается.

## § 34. Соотношение неопределенности для времени и энергии

Из общего аппарата квантовой механики может быть выведено, как показал Л. И. Мандельштам и И. Е. Тамм[1]), соотношение между неопределенностью в энергии $\Delta E$ и некоторым интервалом времени $\Delta t$. Действительно, полная энергия замкнутой системы может не иметь определенного постоянного во времени значения. Постоянно во времени, как мы выяснили в § 32, ее среднее значение и вероятности измерения того или иного возможного значения. Иными словами, сохраняется во времени вид функции распределения по энергиям.

Зная функцию распределения, можно определить обычным образом величину среднеквадратичного отклонения энергии $\Delta E$, которая тоже, естественно, сохраняется во времени. Энергия бу-

[1]) Л. И. Мандельштам и И. Е. Тамм, Изв. АН СССР, сер. физич. 9, 122 (1945).

дет иметь вполне определенное значение ($\Delta E = 0$) только, если система находится в стационарном состоянии. Характерным признаком стационарного состояния является постоянство во времени физических величин, относящихся к данной системе.

Итак, предположим, что замкнутая система находится в начальный момент времени в состоянии с неопределенной энергией $E$. Пусть, далее, $R$ — некоторая величина, оператор которой $\hat{R}$ не зависит от времени явно. Для данной величины можно определить обычным образом ее среднеквадратичное отклонение $\Delta R$ и среднее значение $\overline{R}$. Пользуясь (24,5) и (31,5), напишем соотношения

$$\Delta E\,\Delta R \geqslant \frac{1}{2}\,|\,\overline{(\hat{H}\hat{R} - \hat{R}\hat{H})}\,|, \tag{34,1}$$

$$\hbar\dot{\overline{R}} = i\,\overline{(\hat{H}\hat{R} - \hat{R}\hat{H})}. \tag{34,2}$$

Подставляя (34, 2) в (34, 1), соответственно получаем

$$\Delta E\,\Delta R \geqslant \frac{\hbar}{2}\,|\,\dot{\overline{R}}\,|. \tag{34,3}$$

Это соотношение связывает между собой неопределенность в энергии $\Delta E$, неопределенность $\Delta R$ в величине $R$ и скорость изменения среднего значения величины $R$. Соотношение (34, 3) можно переписать в несколько более удобном виде, если ввести интервал $\Delta t$ — время, за которое среднее значение $R$ меняется на величину порядка своего среднеквадратичного отклонения $\Delta R$

$$\Delta t = \frac{\Delta R}{\dot{\overline{R}}}. \tag{34,4}$$

Тогда имеем

$$\Delta E\,\Delta t \geqslant \frac{\hbar}{2}. \tag{34,5}$$

В частности, из (34,3) следует, что для того, чтобы величина $\overline{R}$ могла меняться со временем, $R$ должна обладать отличной от нуля дисперсией.

Итак, мы видим, что существует определенная зависимость между дисперсией полной энергии системы и скоростью изменения произвольных величин, относящихся к рассматриваемой системе.

В качестве наиболее простого примера рассмотрим одномерный волновой пакет. За величину $R$ возьмем координату $x$, $R = x$. Тогда $\Delta R$ есть ширина пакета, а $\Delta t$ — время прохождения пакета через какую-то точку пространства. Соотношение (34,5) показывает, что время прохождения существенно зависит от дисперсии полной энергии $\Delta E$.

Из неравенства (34,5) следует также определенная связь между временем жизни данного состояния и неопределенностью в энергии $\Delta E$ этого состояния. Так, полагая $\Delta t$ равным $\tau$ — периоду полураспада системы, мы получаем по порядку величины

$$\Gamma \sim \frac{\hbar}{2}\frac{1}{\tau}, \tag{34,6}$$

где $\Gamma$ — неопределенность в энергии начального состояния, дает ширину соответствующей спектральной линии. Более детально вопрос о связи закона распада с функцией распределения энергии рассмотрен в работе Н. С. Крылова и В. А. Фока [1]). В этой работе также показано, что, так как соотношение (34,5) выведено с использованием уравнения Шредингера, оно не может быть применено к процессам измерения. Это следует, например, из того, что данный объект во время процесса измерения уже не составляет замкнутой квантовомеханической системы.

Для процессов измерения соответствующее неравенство должно быть сформулировано в виде некоторого физического принципа (сформулированного Бором)

$$\Delta(E - E')\Delta t > \hbar, \tag{34,7}$$

где $E$ и $E'$ — значения энергии объекта до и после процесса измерения, а $\Delta(E - E')$ — абсолютная величина неопределенности в изменении энергии объекта, т. е. соответствующая погрешность измерения, если оно производилось за время $\Delta t$.

Соотношение (34,7) очень важно для анализа результатов измерения, т. е. проверки на опыте результатов, даваемых квантовой механикой. Мы проиллюстрируем его на простейшем примере свободной частицы. Для измерения величин $E$, $p$, $v$ (энергии, импульса, скорости), относящихся к частице (частице-объекту), нужно рассмотреть столкновение этой частицы с другой системой (частицей-прибором). Предполагая для простоты движение одномерным, напишем закон сохранения импульса

$$p + k - p' - k' = 0. \tag{34,8}$$

Здесь через $k$ и $k'$ мы обозначили импульс частицы-прибора до и после столкновения. Штрихами мы будем обозначать величины, относящиеся к системам после столкновения. Можно считать, что импульс частицы-прибора до и после столкновения измерен точно. Тогда из соотношения (34,8) следует равенство погрешностей в измерении импульса частицы-объекта до и после столкновения

$$\Delta p = \Delta p'. \tag{34,9}$$

---

[1]) И. С. Крылов и В. А. Фок, ЖЭТФ **17**, 93 (1947).

Погрешность в измерении энергии может быть выражена через погрешность в измерении импульса, так как

$$\Delta E = \frac{\partial E}{\partial p}\Delta p = v\,\Delta p, \quad \Delta E' = \frac{\partial E'}{\partial p'}\Delta p' = v'\,\Delta p'.$$

Ввиду равенства погрешностей $\Delta p$ и $\Delta p'$ имеем

$$\Delta(E - E') = |v - v'|\,\Delta p. \tag{34,10}$$

Умножим равенство (34,10) на время измерения $\Delta t$. Тогда получим

$$\Delta(E - E')\,\Delta t = |v - v'|\,\Delta p\,\Delta t. \tag{34,11}$$

Но величина $|v - v'|\Delta t$ представляет ту дополнительную погрешность в координате, которая появилась за время измерения $\Delta t$. Полная неопределенность координаты $\Delta x$ может быть записана в виде

$$\Delta x = (\Delta x)_0 + |v - v'|\,\Delta t,$$

где $(\Delta x)_0$ — неопределенность координаты частицы-объекта, имевшаяся до рассматриваемого столкновения. В частности, $(\Delta x)_0$ может быть достаточно малым. То обстоятельство, что при этом будет большой величина $(\Delta p)_0$, не существенно, поскольку $(\Delta p)_0$ никак не связано с рассматриваемой погрешностью $\Delta p$.

Соотношение неопределенности Гейзенберга $\Delta p\,\Delta x \gtrsim \hbar$ должно выполняться независимо от величины $(\Delta x)_0$, следовательно,

$$|v - v'|\,\Delta t\,\Delta p > \hbar. \tag{34,12}$$

Сравнивания с (34,11), приходим к неравенству

$$\Delta(E - E')\,\Delta t > \hbar \tag{34,13}$$

в согласии с (34, 7). Мы видим, что погрешность в измерении энергии стремится к нулю, только если процесс измерения длится достаточно долго (в пределе при $\Delta t \to \infty$).

Отметим еще, что, как следует из (34,12), измерение импульса при данной величине погрешности $\Delta p$ заведомо ведет к изменению скорости частицы:

$$|v - v'| > \frac{\hbar}{\Delta p\,\Delta t},$$

а следовательно, к изменению и импульса. Только если измерение производится сколь угодно долго ($\Delta t \to \infty$), импульс не изменяется. Конечно, длительное измерение импульса может иметь смысл, только если частица свободна. Итак, мы видим, что процесс измерения импульса через небольшие промежутки времени неповторим. Измерение переводит микрообъект в совершенно новое состояние (ср. § 5).

ГЛАВА IV

# ДВИЖЕНИЕ В ПОЛЕ С ЦЕНТРАЛЬНОЙ СИММЕТРИЕЙ

## § 35. Уравнение Шредингера

Мы можем теперь применить развитый в предыдущей главе расчетный аппарат квантовой механики к изучению свойств реальных систем. Естественно остановиться прежде всего на атоме водорода как простейшей атомной системе. В атоме водорода потенциальная энергия взаимодействия электрона с ядром зависит только от расстояния между ними $|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|$. Задача движения двух частиц с законом взаимодействия $U(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|)$ сводится, как мы выяснили в § 14, к задаче движения одной частицы с приведенной массой $\mu$ в поле $U(r)$. Ввиду большой разницы в массах приведенная масса $\mu$ очень близка к массе электрона. Если также пренебречь размерами протона, то атом водорода представляет электрон, движущийся в кулоновском поле неподвижного центра. Такое поле является частным случаем поля с центральной симметрией, в котором потенциальная энергия зависит только от расстояния до силового центра. Мы рассмотрим движение электрона в поле с центральной симметрией самого общего вида, а затем уже перейдем к случаю кулоновского поля.

Уравнение Шредингера для стационарных состояний частицы, движущейся в силовом поле с потенциальной энергией $U(r)$, имеет вид

$$\Delta\psi + \frac{2\mu}{\hbar^2}[E - U(r)]\psi = 0. \qquad (35,1)$$

В случае потенциального поля с центральной симметрией уравнение Шредингера удобно преобразовать к сферическим координатам, поскольку потенциальная энергия зависит только от расстояния до начала координат $r$. Выражая оператор Лапласа в сферических координатах, имеем

$$\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial\psi}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2}\Delta_{\vartheta_\varphi}\psi + \frac{2\mu}{\hbar^2}[E - U(r)]\psi = 0. \qquad (35,2)$$

Это уравнение удобно преобразовать, введя в него явным образом оператор квадрата момента $\hat{l}^2$. Подставляя его значение согласно формуле (30,9), имеем окончательно

$$\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial\psi}{\partial r}\right)-\frac{\hat{l}^2}{\hbar^2 r^2}\psi+\frac{2\mu}{\hbar^2}(E-U(r))\psi=0. \qquad (35,3)$$

Покажем, прежде всего, что при движении в поле с центральной симметрией, помимо закона сохранения энергии, имеют место еще два закона сохранения — закон сохранения полного момента количества движения и проекции момента на ось $z$, произвольным образом ориентированную в пространстве; причем, когда мы говорим о сохранении полного момента, то имеется в виду величина, изображаемая оператором $\hat{l}^2$ (квадрат момента). Для этого, согласно общим правилам, рассмотрим условия коммутации операторов $\hat{l}^2$ и $\hat{l}_z$ с гамильтонианом. В нашем случае гамильтониан $\hat{H}$ можно, очевидно, написать в виде

$$\hat{H}=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)+\frac{\hat{l}^2}{2\mu r^2}+U(r). \qquad (35,4)$$

В оператор $\hat{l}^2$ входят только угловые переменные $\vartheta$, $\varphi$, а также операторы дифференцирования по этим переменным. Поэтому оператор $\hat{l}^2$ коммутирует с любым оператором дифференцирования по $r$, а также с оператором самой координаты $r$

$$\hat{H}\hat{l}^2-\hat{l}^2\hat{H}=0. \qquad (35,5)$$

Аналогичное соотношение имеет место и для оператора $\hat{l}_z$ ввиду того, что, как мы видели в § 30, он коммутирует с оператором $\hat{l}^2$ (30,4):

$$\hat{H}\hat{l}_z-\hat{l}_z\hat{H}=0. \qquad (35,6)$$

Поскольку при движении в поле с центральной симметрией сохраняются три величины — энергия, квадрат момента $l^2$ и проекция момента на произвольную ось $l_z$, мы будем рассматривать состояния с заданными значениями этих трех величин.

Напомним, что при движении в поле с центральной симметрией законы сохранения энергии, полного момента количества движения и его проекции на ось $z$ имеют место и в классической механике.

Мы рассмотрели уже ранее состояния системы с заданными значениями полного момента и его проекции на оси $z$. Собственные значения операторов $\hat{l}^2$ и $\hat{l}_z$ характеризовались азимутальным и магнитным квантовыми числами $l$ и $m$, а собственными функциями этих операторов служили сферические функции $Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$ с индексами $l$, $m$.

Уравнение (35,3) допускает разделение переменных. Угловая часть его совпадает с уравнением (30,14). Она описывает движение с заданными значениями $l$ и $m$. Поэтому решение (35,3) естественно пытаться искать в виде

$$\psi(r, \vartheta, \varphi) = R(r) Y_{lm}(\vartheta, \varphi). \tag{35,7}$$

Подставляя выражение (35,7) в уравнение (35,3) и учитывая, что $\hat{l}^2 Y_{lm} = \hbar^2 l(l+1) Y_{lm}$, мы приходим к следующему уравнению для радиальной части волновой функции $R(r)$:

$$\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2 \frac{dR}{dr}\right) + \frac{2\mu}{\hbar^2}\left(E - U(r) - \frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{l(l+1)}{r^2}\right) R = 0. \tag{35,8}$$

Мы видим, что выражение для радиальной составляющей $R$ волновой функции $\psi$ существенно зависит от вида потенциальной энергии $U(r)$. В то же время угловая часть $Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$ волновой функции определяется лишь величиной момента количества движения частицы (число $l$) и его проекцией на ось $z$ (число $m$). Состояния с заданным моментом количества движения обозначаются малыми буквами латинского алфавита:

$$\begin{matrix} l = 0 & 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 & 7 \\ s & p & d & f & g & h & i & k \end{matrix}$$

Значением квантового числа $l$ определяется также четность состояния. В § 33 мы показали, что в состоянии с заданными полным моментом количества движения и его проекцией на ось $z$ четность равна $(-1)^l$, т. е. при преобразовании инверсии сферическая функция $Y_{lm}$ переходит в $(-1)^l Y_{lm}$. Так как радиальная волновая функция, зависящая от абсолютной величины радиуса-вектора, не меняется при инверсии, то указанный закон преобразования относится и к полной волновой функции

$$\psi(r, \vartheta, \varphi) \to (-1)^l \psi(r, \vartheta, \varphi).$$

Таким образом, состояния $s$, $d$, $g$, ... являются четными, а $p$, $f$, $h$ ... — нечетными (при положительной внутренней четности).

Вероятность того, что электрон, находящийся в состоянии $\psi(r, \vartheta, \varphi) = R(r) Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$, будет обнаружен в бесконечно малом элементе объема с координатами $r$, $\vartheta$, $\varphi$, дается формулой

$$dW(r, \vartheta, \varphi) = |\psi(r, \vartheta, \varphi)|^2 r^2\, dr\, d\Omega, \tag{35,9}$$

где $d\Omega = \sin\vartheta\, d\vartheta\, d\varphi$. Если проинтегрировать это выражение по всем значениям углов $\vartheta$, $\varphi$, то мы получим вероятность обнаружить электрон в сферическом слое между $r$ и $r + dr$

$$dW(r) = |R(r)|^2 r^2\, dr. \tag{35,10}$$

Проинтегрировав (35,9) по всем значениям радиуса $r$ от 0 до $\infty$, находим вероятность $dW(\vartheta, \varphi)$ обнаружить электрон в телесном угле $d\Omega$ в направлении, определяемом углами $\vartheta$, $\varphi$

$$dW_{lm}(\vartheta, \varphi) = |Y_{lm}|^2 d\Omega. \qquad (35,11)$$

Из определения сферической функции (30,16) следует, что последнее выражение не зависит от угла $\varphi$. Это означает, что в плоскости, перпендикулярной оси $z$, распределение вероятности нахождения частицы совершенно симметрично. Напомним, что под осью $z$ мы понимаем произвольно выбранное направление в пространстве, причем фиксирована проекция момента количества движения на это направление. Таким образом, из (35,11) следует

$$dW_{lm} \sim \left| P_l^m(\cos\vartheta) \right|^2 d\Omega. \qquad (35,12)$$

Распределение вероятности (35,12) определяется двумя квантовыми числами $l$ и $m$, т. е. зависит от величины полного момента количества движения и его проекции на ось $z$.

Состояние с $l = 0$ ($s$-состояние) обладает сферической симметрией, так как при $l = 0$ (следовательно и $m = 0$) $P_0^0 = \text{const}$

$$dW_{00} = \frac{1}{4\pi} d\Omega. \qquad (35,13)$$

В $p$-состоянии ($l = 1$) распределение вероятности дается следующими выражениями:

$$\left.\begin{aligned} dW_{1,\pm 1} &= \frac{3}{8\pi}\sin^2\vartheta\, d\Omega, \\ dW_{10} &= \frac{3}{4\pi}\cos^2\vartheta\, d\Omega. \end{aligned}\right\} \qquad (35,14)$$

Графически, для различных $l$ и $m$, распределения (35,12) представлены на рис. 8 в виде полярных диаграмм [1]).

Рассмотрим более детально уравнение (35,8) для радиальной составляющей волновой функции. Прежде всего из него следует, что энергия частицы не зависит от проекции момента количества движения на ось $z$. Это связано с тем, что в сферически-симметричном поле все направления являются равноправными. Таким образом, изотропия пространства приводит к вырождению уровней системы, энергия которых не зависит от квантового числа $m$. Следует заметить, что вырождение всегда обусловлено определенными свойствами симметрии рассматриваемой системы.

---

[1]) Вероятность $\frac{dW_{lm}}{d\Omega}$ отложена по радиусу-вектору, проведенному под углом $\vartheta$ к оси $z$.

Вместо функции $R$ удобно ввести функцию $\chi(r)$:

$$R(r) = \frac{1}{r}\chi(r). \tag{35,15}$$

Для $\chi(r)$ находим

$$\frac{d^2\chi}{dr^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2}\left(E - U(r) - \frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{l(l+1)}{r^2}\right)\chi = 0. \tag{35,16}$$

Условие конечности волновой функции при $r = 0$ приводит к требованию

$$\chi(0) = 0. \tag{35,17}$$

Уравнение для радиальной функции (35,8) свелось к уравнению одномерного движения с эффективной потенциальной энергией, равной

$$U_{\text{эфф}}(r) = U(r) + \frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{l(l+1)}{r^2}. \tag{35,18}$$

Как и в классической механике, величина $\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{l(l+l)}{r^2}$ именуется центробежной энергией.

Не конкретизируя детального вида потенциальной энергии $U(r)$, можно, тем не менее, сделать определенные заключения

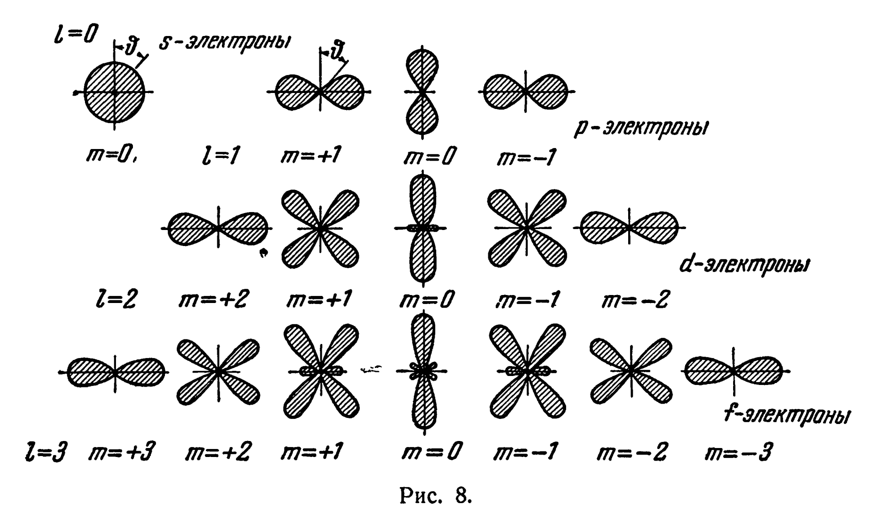



Рис. 8.

о поведении волновой функции вблизи начала координат и на очень больших расстояниях от силового центра.

Исследуем сперва область малых расстояний $r \to 0$. Будем считать, что вблизи начала координат потенциальная энергия взаимодействия $U(r)$ изменяется достаточно медленно, так что

имеет место условие

$$\lim_{r\to 0} r^2 U(r) = 0. \qquad (35,19)$$

Это условие означает, что $|U(r)|$ при $r \to 0$ растет медленнее, чем $1/r^2$. Оно выполнено, в частности, для электрона, находящегося в кулоновском поле ядра. При этом в уравнении (35,16) при $r \to 0$ можно пренебречь членами $E\chi$ и $U(r)\chi$ по сравнению с членом $\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{l(l+1)}{r^2}\chi$. Тогда получим

$$\frac{d^2\chi}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2}\chi = 0.$$

Решение последнего уравнения ищем в виде

$$\chi = Ar^{\gamma}.$$

Подставляя это выражение в уравнение, имеем

$$\gamma(\gamma - 1) = l(l+1). \qquad (35,20)$$

Уравнение (35,20) имеет два корня:

$$\gamma_1 = l + 1; \quad \gamma_2 = -l.$$

Второй корень мы должны отбросить, так как ему отвечает функция $R$, которая неограниченно возрастает при $r \to 0$. Таким образом, окончательно получаем, что на малых расстояниях $\chi(r) \sim r^{l+1}$, а радиальная часть волновой функции выражается формулой

$$R(r) = Ar^l. \qquad (35,21)$$

Вероятность найти частицу на данном расстоянии $r$ от центра независимо от углов $\vartheta$ и $\varphi$ дается квадратом модуля радиальной функции, т. е. величиной $|R|^2 r^2\, dr$.

Из (35,21) следует, что при малых $r$ эта вероятность пропорциональна $r^{2l+2}\, dr$ и тем меньше, чем больше $l$. Центробежная сила как бы отбрасывает частицу от центра.

Исследуем далее асимптотическое поведение волновой функции на больших расстояниях от начала координат. На больших расстояниях сила, действующая на частицу, стремится к нулю и, следовательно, потенциальная энергия $U(r)$ — к некоторой постоянной. Всюду, где это не оговорено особо, мы будем выбирать эту постоянную за начало отсчета потенциальной энергии, т. е. считать, что

$$\lim_{r\to\infty} U(r) = 0.$$

Тогда в уравнении (35,16) при больших $r$ можно пренебречь

слагаемыми $U\chi$ и $\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{l(l+1)}{r^2}\chi$ по сравнению с членом $E\chi$[1]. При этом уравнение (35,16) приобретает вид

$$\frac{d^2\chi}{dr^2}+k^2\chi=0,\quad k=\sqrt{\frac{2\mu E}{\hbar^2}}. \tag{35,22}$$

Решение последнего уравнения можно, очевидно, написать как

$$\chi=A_1e^{ikr}+A_2e^{-ikr}, \tag{35,23}$$

где $A_1$ и $A_2$ — постоянные интегрирования.

Рассмотрим, прежде всего, решения, отвечающие положительным значениям энергии. При $E>0$ величина $k$, определяемая формулой (35,22), имеет вещественное значение. Радиальная часть волновой функции (35,15) сводится к сумме двух функций

$$R(r)=A_1\frac{e^{ikr}}{r}+A_2\frac{e^{-ikr}}{r}. \tag{35,24}$$

Так как оба слагаемых ограничены по модулю, то ни одна из постоянных $A_1$ и $A_2$ не должна быть равной нулю. Вдали от силового центра радиальная функция представляет суперпозицию сходящейся и расходящейся сферических волн.

Определенное заключение может быть сделано и относительно энергетического спектра частицы при произвольном виде энергии взаимодействия $U(r)$. Действительно, функция (35,23) не обращается в нуль на бесконечности, что соответствует инфинитному движению, т. е. движению, при котором частица или система уходит на бесконечность. Интеграл от квадрата модуля функции (35,24), взятый по всему пространству, расходится. Но, как мы отметили в § 16, такие функции отвечают сплошному спектру. Следовательно, при $E>0$ энергетический спектр является сплошным. Если радиальная составляющая плотности потока равна нулю, то функция (35,24) должна быть вещественной. Соответственно полагаем:

$$A_1=\frac{1}{2i}A'e^{i\alpha},\quad A_2=-\frac{1}{2i}A'e^{-i\alpha}, \tag{35,25}$$

причем $A'$ и $\alpha$ уже действительны.

Тогда в соответствии с (35,24) радиальная функция $R$ приобретает вид

$$R=A'\frac{\sin(kr+\alpha)}{r}, \tag{35,26}$$

где фаза $\alpha$ зависит от $k$, $l$, а также конкретного вида функции

[1]) Из более детального анализа следует, что это законно, если потенциальная энергия на бесконечности убывает по закону $1/r^n$, где $n>1$. См., например, Л. Д. Ландау и Е. М. Лифшиц, Квантовая механика, Физматгиз, 1963, стр. 138, 547; В. А. Фок, Начала квантовой механики, Кубуч, 1932, стр. 126.

$U(r)$. В следующем параграфе мы покажем, что для свободной частицы $(U \equiv 0)\ \alpha = -\frac{l\pi}{2}$. В соответствии с этим полагаем

$$\alpha = -\frac{l\pi}{2} + \delta_l, \tag{35,27}$$

где фазы $\delta_l$ непосредственно связаны с действием силового поля на частицу и обращаются в нуль для свободного движения.

Рассмотрим теперь область отрицательных энергий $E < 0$. Поскольку кинетическая энергия частицы всегда положительна, полная энергия может быть отрицательной только в случае притяжения частицы к центру. Если $E < 0$, величина $k$ имеет чисто мнимые значения, т. е. $k = i\varkappa$, где $\varkappa = \sqrt{-\frac{2\mu E}{\hbar^2}}$. Радиальная функция (35,24) запишется в виде

$$R = A_1 \frac{e^{-\varkappa r}}{r} + A_2 \frac{e^{\varkappa r}}{r}. \tag{35,28}$$

Чтобы удовлетворить требованию конечности волновой функции при $r \to \infty$, мы должны положить постоянную $A_2$ равной нулю

$$R = A_1 \frac{e^{-\varkappa r}}{r}. \tag{35,29}$$

Тогда радиальная волновая функция $R$ стремится к нулю при $r \to \infty$. Это означает, что вероятность нахождения частицы на бесконечно большом расстоянии от центра сил равна нулю. Следовательно, движение частицы является финитным. Мы видим, что имеется сходство между выводами квантовой и классической механики: при положительной полной энергии $(E > U(\infty))$ частицы уходят на бесконечность, при отрицательной — совершают финитное движение.

Рассмотрим теперь вопрос о спектре энергий при $E < 0$. Как мы выяснили, этим энергиям отвечает финитное движение и соответствующие волновые функции (35,29) квадратично интегрируемы. Такие волновые функции, как указывалось в § 16, принадлежат дискретному спектру. Следовательно, при $E < 0$ мы имеем дискретный энергетический спектр.

Общее решение уравнения Шредингера (35,2) можно представить в виде суперпозиции волновых функций (35,7)

$$\psi(r, \vartheta, \varphi) = \sum_{l, m} B_{lm} R_l(r) Y_{lm}(\vartheta, \varphi). \tag{35,30}$$

Для решения, не зависящего от угла $\varphi$, мы имеем более простое выражение (суперпозиция состояний с $m = 0$)

$$\psi(r, \vartheta) = \sum_l c_l R_l(r) P_l(\cos\vartheta). \tag{35,31}$$

## § 36. Свободное движение частицы с заданным моментом количества движения

До сих пор мы представляли свободно движущуюся частицу плоской волной $e^{i(kr-\omega t)}$, где $k$ — волновой вектор частицы $k=\frac{p}{\hbar}$, а $\omega=\frac{E}{\hbar}$. Эта волновая функция описывает стационарное состояние с определенным значением импульса и энергии $E=\frac{p^2}{2m}$ частицы. Для дальнейшего нам следует найти волновые функции таких стационарных состояний свободно движущейся частицы, в которых, помимо определенного значения энергии $E$, заданы также величина ее момента количества движения и проекции момента на ось $z$. В классической механике свободная частица, движущаяся с определенным импульсом, автоматически обладает и определенным моментом количества движения. В квантовой механике положение существенно меняется. В состоянии с заданным импульсом момент количества движения является неопределенной величиной. С другой стороны, в состоянии с заданным моментом количества движения и его проекцией на ось $z$ направление импульса также неопределенно. Это связано с тем, что соответствующие величины одновременно не могут иметь определенных значений.

Для того чтобы найти нужную нам волновую функцию, рассмотрим движение свободной частицы в сферических координатах. Положив в уравнении Шредингера (35,3) $U(r)\equiv 0$, имеем

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial\psi}{\partial r}\right)+\frac{\hat{l}^2}{2mr^2}\psi=E\psi. \qquad (36,1)$$

Будем искать волновую функцию свободной частицы в виде

$$\psi_{klm}(r, \vartheta, \varphi)=R_{kl}(r)Y_{lm}(\vartheta, \varphi). \qquad (36,2)$$

При этом радиальная функция $R_{kl}$ должна удовлетворять уравнению (35,8), в котором следует положить $U\equiv 0$

$$\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR_{kl}}{dr}\right)+\left(k^2-\frac{l(l+1)}{r^2}\right)R_{kl}=0. \qquad (36,3)$$

Здесь мы выразили энергию $E$ через волновое число $k$. При $l=0$ уравнение перепишется в виде

$$\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR_{k0}}{dr}\right)+k^2R_{k0}=0. \qquad (36,4)$$

Решением последнего уравнения, не обращающимся в бесконечность в начале координат, служит функция

$$R_{k0}=A\frac{\sin kr}{r}. \qquad (36,5)$$

Для нахождения решения уравнения (36,3) при $l \neq 0$ введем новую функцию по формуле

$$R_{kl} = \frac{Z}{\sqrt{s}}, \qquad (36,6)$$

где $s = kr$. При такой замене уравнение (36,3) легко преобразовать к виду

$$\frac{d^2Z}{ds^2} + \frac{1}{s}\frac{dZ}{ds} + \left(1 - \frac{\left(l+\frac{1}{2}\right)^2}{s^2}\right) Z = 0. \qquad (36,7)$$

Решением уравнения (36,7), удовлетворяющим условию конечности волновой функции в начале координат, является функция Бесселя полуцелого порядка

$$Z(s) = CJ_{l+\frac{1}{2}}(s). \qquad (36,8)$$

Соответственно для радиальной функции имеем

$$R_{kl} = C\,\frac{J_{l+\frac{1}{2}}(kr)}{\sqrt{kr}}. \qquad (36,9)$$

Вдали от начала координат ($r \to \infty$) можно воспользоваться известным асимптотическим выражением для функции Бесселя и получить асимптотическое значение $R_{kl}(r)$

$$R_{kl}(r) = C\sqrt{\frac{2}{\pi}}\,\frac{\sin\left(kr - l\frac{\pi}{2}\right)}{kr}. \qquad (36,10)$$

Постоянная $C$ определяется условием нормировки. На малых расстояниях от силового центра ($r \to 0$) радиальная функция (36,9) приобретает вид

$$R_{kl} \sim r^l \qquad (36,11)$$

в согласии с общим выражением (35,21).

## § 37. Сферическая яма

В качестве наиболее простого и в то же время важного примера рассмотрим движение частицы в поле с центральной симметрией, определяемом выражением

$$U(r) = \begin{cases} -U_0 & (r \leqslant a), \\ 0 & (r > a). \end{cases}$$

Поле такого типа принято называть сферически-симметричной потенциальной ямой. Потенциальная яма, изображенная на

рис. 9, представляет идеализированную модель системы, в которой силовое взаимодействие с центром осуществляется так называемыми короткодействующими силами. Под короткодействующими силами понимают силы, которые настолько быстро спадают с расстоянием, что их можно считать практически равными нулю на расстояниях, превышающих некоторое расстояние $a$, именуемое радиусом действия короткодействующих сил. Важность рассмотрения систем с короткодействующими силами ясна, например, из того, что к силам этого типа принадлежат силы взаимодействия между нуклонами — ядерные силы.

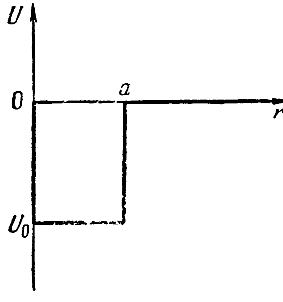


Рис. 9.

Идеализация системы с помощью модели сферической потенциальной ямы сводится к предположениям о полной изотропии сил и постоянстве потенциальной энергии при $r < a$.

Для простоты рассмотрим движение частицы с моментом количества движения $l = 0$. Возможны, очевидно, два различных режима движения. При $E < 0$ полная энергия частицы меньше, чем потенциальная энергия на бесконечности, что соответствует финитному движению. Наоборот, при $E > 0$ имеет место инфинитное движение. Первому случаю, которым мы и ограничимся, соответствует дискретный энергетический спектр, второму — непрерывный.

Волновая функция частицы с $l = 0$ зависит только от координаты $r$, но не от углов $\vartheta$ и $\varphi$. Уравнение Шредингера после подстановки $\chi(r) = rR(r)$ будет иметь вид (35,16)

$$\frac{d^2\chi}{dr^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E + U_0)\chi = 0 \qquad (r \leqslant a), \tag{37,1}$$

$$\frac{d^2\chi}{dr^2} + \frac{2m}{\hbar^2}E\chi = 0 \qquad (r > a). \tag{37,2}$$

Напишем решение уравнения (37,1) в виде

$$\chi(r) = A\sin\varkappa r + B\cos\varkappa r, \tag{37,3}$$

где обозначено

$$\varkappa = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(U_0 - |E|)}.$$

Для конечности волновой функции $R$ в начале координат необходимо положить $\chi(0) = 0$. Следовательно, внутри ямы решение уравнения (37,1) имеет вид

$$\chi(r) = A\sin\varkappa r. \tag{37,4}$$

Решение вне ямы, обращающееся в нуль на бесконечности, выражается формулой

$$\chi(r) = Be^{-\varkappa' r}, \qquad (37,5)$$

где через $\varkappa'$ обозначена величина $\varkappa' = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}|E|}$.

Из непрерывности волновой функции следует, что решение (37,4) должно непрерывно переходить в решение (37,5) на поверхности сферы $r = a$. Производная от волновой функции также должна быть непрерывна на этой поверхности. Поэтому мы можем приравнять друг другу логарифмические производные от функций (37,4) и (37,5) при $r = a$. Тогда получаем:

$$\varkappa \operatorname{ctg} \varkappa a = -\varkappa'. \qquad (37,6)$$

Это соотношение можно переписать в виде

$$\sin \varkappa a = \pm \frac{1}{\sqrt{\frac{\varkappa'^2}{\varkappa^2} + 1}} \qquad (37,7)$$

или, учитывая выражение для $\varkappa$ и $\varkappa'$, имеем

$$\sin \varkappa a = \pm \sqrt{\frac{\hbar^2}{2mU_0 a^2}}\, \varkappa a. \qquad (37,8)$$

Корни уравнения (37,8) определяют уровни энергии частицы в яме. Уравнение (37,8) удобно решать графически. Именно, корни уравнения (37,8) являются точками пересечения прямых $y_1 = \sqrt{\frac{\hbar^2}{2mU_0 a^2}}\, \varkappa a$ и $y_1' = -\sqrt{\frac{\hbar^2}{2mU_0 a^2}}\, \varkappa a$ с кривой $\sin \varkappa a$ (см. рис. 10). При этом должны быть выбраны только такие точки пересечения, для которых $\operatorname{ctg} \varkappa a$ имеет в соответствии с (37,6) отрицательные значения. Из графика рис. 10 видно, что корни уравнения (37,8) существуют не всегда. Чтобы появилось связанное состояние (уровень энергии), яма должна быть достаточно глубокой. Определим минимальную глубину $U_{0\,\text{мин}}$, соответствующую появлению первого уровня энергии. Как видно из рис. 10, первый уровень появляется при условии, что прямая проходит через вершину синусоиды $\varkappa a = \frac{\pi}{2}$. При этом тангенс угла

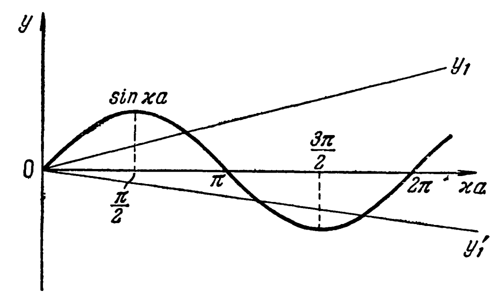



Рис. 10.

наклона прямой равен $2/\pi$. Следовательно, минимальная потенциальная энергия $U_{0\,\text{мин}}$, при которой существует связанное состояние частицы в сферической яме, определится условием

$$\sqrt{\frac{\hbar^2}{2mU_{0\,\text{мин}}a^2}} = \frac{2}{\pi},$$

откуда

$$U_{0\,\text{мин}} = \frac{\pi^2}{8}\frac{\hbar^2}{ma^2}. \qquad (37,9)$$

Первый уровень энергии в потенциальной яме минимальной глубины $U_{0\,\text{мин}}$ мы найдем из условия

$$\varkappa a = \frac{\pi}{2}$$

или

$$\sqrt{\frac{2ma^2}{\hbar^2}(U_{0\,\text{мин}} - |E_1|)} = \frac{\pi}{2}.$$

Учитывая значение $U_{0\,\text{мин}}$, находим, что $E_1 = 0$, т. е. энергия частицы на первом уровне равна нулю, никаких других уровней в яме не имеется. С увеличением глубины ямы энергия первого уровня также понижается и становится отрицательной. На графике это соответствует уменьшению угла наклона прямой к оси абсцисс. При некотором угле наклона помимо корня, соответствующего первому уровню, появится и второй корень. Последний отвечает появлению в яме второго уровня энергии. С увеличением глубины ямы число точек пересечения на графике возрастает, что отвечает увеличению числа уровней энергии у частицы в потенциальной яме.

В заключение подчеркнем, что отсутствие связанных состояний частицы в потенциальной яме глубиной $U_0 < U_{0\,\text{мин}}$ представляет специфический квантовомеханический эффект, не имеющий аналога в классической физике. Действительно, как бы ни была мала глубина ямы в классической физике, частица, попавшая в яму с начальной кинетической энергией, меньшей глубины ямы, будет удерживаться в ней как угодно долго. В квантовой механике это положение в общем случае не имеет места.

## § 38. Движение в кулоновском поле

Как мы уже указывали, важнейшим примером движения частицы в поле с центральной симметрией является движение электрона в кулоновском поле атомного ядра. Простейшую атомную систему такого рода, состоящую из ядра и одного электрона, представляет атом водорода, а также ион любого атома, в котором остался только один электрон. Другим примером мо-

жет служить атом мезоводорода, состоящий из протона и отрицательно заряженного мезона.

Задача движения двух тел, ядра и электрона, сводится к задаче движения одной частицы с приведенной массой $\mu$ в кулоновском поле (см. § 14).

Совершенно ясно, что теория атома водорода и водородоподобных систем чрезвычайно важна, поскольку эти системы являются простейшими атомными системами. Кроме того, оказывается, что в случае движения частицы в кулоновском поле ядра можно получить полное аналитическое решение уравнения Шредингера. Это позволяет наглядно проследить за проявлением общих квантовомеханических закономерностей в атомных системах.

Потенциальная энергия электрона, движущегося в поле ядра с зарядом $Ze$, дается формулой

$$U(r) = -\frac{Ze^2}{r}. \tag{38,1}$$

Выпишем уравнение Шредингера для радиальной волновой функции (35,8):

$$\frac{d^2R}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{dR}{dr} - \frac{l(l+1)}{r^2}R + \frac{2\mu}{\hbar^2}\left(E + \frac{Ze^2}{r}\right)R = 0. \tag{38,2}$$

Мы будем первоначально интересоваться состояниями, принадлежащими дискретному энергетическому спектру. В соответствии с выводами § 16 эти состояния отвечают финитному движению электрона и, следовательно, их энергия отрицательна $E < 0$ (см. § 35).

При решении уравнения (38,2) удобно перейти к безразмерным величинам. Это сделает все формулы менее громоздкими.

В качестве основных величин выберем заряд электрона $e$, его приведеную массу $\mu$ и постоянную Планка $\hbar$. Из этих величин можно составить комбинацию, имеющую размерность длины

$$a = \frac{\hbar^2}{\mu e^2}. \tag{38,3}$$

Как мы увидим ниже, эта длина является характерным атомным размером. Если положить приведенную массу $\mu$ равной массе электрона $m$, то $a = 0{,}529 \cdot 10^{-8}$ *см*.

Система единиц, в основу которой положены величины $e$, $\mu$ и $a$, называется кулоновой системой.

Единицей скорости будет служить величина $e^2/\hbar$, равная $^1/_{137}$ скорости света, единицей энергии — величина, равная

$$E_0 = \frac{\mu e^4}{\hbar^2} = \frac{e^2}{a}. \tag{38,4}$$

При $\mu = m$ $E_0 = 4{,}30 \cdot 10^{-11}$ *эрг* $= 27{,}07$ *эв*. Введем в уравнение (38,2) безразмерную переменную $\rho$ и энергию $\varepsilon$

$$\rho = \frac{r}{a}, \quad \varepsilon = -\frac{E}{E_0}. \tag{38,5}$$

Тогда это уравнение перепишется в виде

$$\frac{d^2R}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho}\frac{dR}{d\rho} + \left(-2\varepsilon - \frac{l(l+1)}{\rho^2} + \frac{2Z}{\rho}\right) R = 0. \tag{38,6}$$

На малых расстояниях функция $R$ ведет себя, согласно (35,21), как $\rho^l$. На больших расстояниях эта функция имеет вид $R \sim e^{-\sqrt{2\varepsilon}\rho}$ (см. (35,29)). В соответствии с этим будем пытаться искать решение уравнения (38,6) в виде

$$R(\rho) = \rho^l e^{-\beta\rho} v(\rho), \tag{38,7}$$

где $\beta = \sqrt{2\varepsilon}$. Подставляем выражение (38,7) в (38,6), после простых вычислений получаем

$$\rho \frac{d^2v}{d\rho^2} + 2\frac{dv}{d\rho}(l - \beta\rho + 1) + 2v(Z - \beta - \beta l) = 0. \tag{38,8}$$

Введем новую переменную

$$\xi = 2\beta\rho. \tag{38,9}$$

Обозначая штрихом дифференцирование по этой новой переменной, имеем

$$\xi v'' + v'(2l + 2 - \xi) + v\left(\frac{Z}{\beta} - l - 1\right) = 0. \tag{38,10}$$

Радиальная волновая функция $R$ должна оставаться конечной во всей области изменения переменной $\xi$ как при $\xi \to \infty$, так и при $\xi \to 0$.

Решение уравнения (38,10) ищем в виде ряда

$$v(\xi) = \sum_{k=0} a_k \xi^k. \tag{38,11}$$

Подставляя (38,11) в уравнение (38,10) и собирая члены при одинаковых степенях $\xi$, получаем

$$\sum_k \xi^k \left[(k+1)(2l+2+k)\, a_{k+1} + \left(\frac{Z}{\beta} - l - 1 - k\right) a_k\right] = 0. \tag{38,12}$$

Равенство (38,12) будет выполняться при произвольных значениях $\xi$, если равны нулю коэффициенты при всех степенях $\xi$. Приравнивая поэтому квадратную скобку нулю, приходим к следующей рекуррентной формуле:

$$a_{k+1} = \frac{k + l + 1 - \frac{Z}{\beta}}{(k+1)(2l+2+k)} a_k. \tag{38,13}$$

Заметим, что функция $v$, определяемая рядом (38,11), с коэффициентами $a_k$, удовлетворяющими (38,13), может быть выражена через вырожденную гипергеометрическую функцию [1])

$$v = AF\left(1 + l - \frac{Z}{\beta},\ 2l + 2,\ \xi\right). \tag{38,14}$$

Легко показать аналогично тому, как это сделано в § 10, что ряд (38,11) расходится, как $e^{\xi}$ при $\xi \to \infty$. Это означает, что если бы волновая функция выражалась рядом (38,11), она не удовлетворяла бы условию конечности на сколь угодно большом расстоянии от силового центра. Для того чтобы определить функцию, обладающую должными свойствами и являющуюся решением уравнения (38,10), мы должны так же, как это было сделано при решении задачи об осцилляторе, оборвать ряд на некотором члене, т. е. свести его к полиному. Если при некотором значении числа $k = n_r$ коэффициент ряда $a_{n_r+1}$ обращается в нуль, то согласно (38,13) обращаются в нуль и все последующие коэффициенты $a_{n_r+2}$, $a_{n_r+3}$ и т. д. В этом случае бесконечный ряд сводится к полиному степени $n_r$. При больших значениях $\xi$ функция $v(\xi)$ будет возрастать по степенному закону $v(\xi) \sim \xi^{n_r}$. Волновая функция (38,7) при этом будет стремиться к нулю на бесконечности за счет экспоненциального множителя. При $\xi \to 0$ полином $v(\xi)$ стремится к постоянной величине $a_0$, а волновая функция (38,7) соответственно обращается в нуль или стремится к постоянной. Мы видим, таким образом, что волновая функция будет удовлетворять стандартным граничным условиям.

Посмотрим теперь, при каких условиях коэффициент ряда $a_{n_r+1}$ обращается в нуль. Согласно (38,13) для этого необходимо равенство нулю выражения

$$n_r + l + 1 - \frac{Z}{\beta} = 0. \tag{38,15}$$

Так как $n_r$ — целое число (включая и нуль), то сумма $(n_r + l + 1)$ также является целым положительным числом. Обозначим ее через $n$, $n = n_r + l + 1$. Целое число $n$ называется главным квантовым числом, число $n_r$ — радиальным квантовым числом. При фиксированном значении азимутального квантового числа $l$ имеем:

$$n \geqslant l + 1.$$

Соотношение (38,15) определяет, очевидно, расположение уровней энергии системы. Учитывая значение $\beta$, находим:

$$\varepsilon = \frac{Z^2}{2n^2}. \tag{38,16}$$

[1]) См. В. И. Смирнов, Курс высшей математики, Физматгиз, 1958, т. III, ч. 2, стр. 422.

Переходя от атомных к обычным единицам (38,4) и (38,5), получаем

$$E_n = -\frac{\mu e^4 Z^2}{2\hbar^2 n^2} = -13,5\frac{Z^2}{n^2}\ \text{эв}. \qquad (38,17)$$

Эта формула, впервые полученная Н. Бором еще до появления современной квантовой механики, определяет дискретные энергетические уровни в атоме водорода и водородоподобных ионах. Мы видим, что уровни энергии зависят только от главного квантового числа $n$. Значению $n = 1$ соответствует низший энергетический уровень (основное состояние) частицы в кулоновом поле. С ростом $n$ расстояние между уровнями уменьшается, уровни сгущаются при $n \to \infty$, $\Delta E \to 0$ и дискретный спектр переходит в непрерывный.

Радиальная функция $R_{nl}$ дается формулой

$$R_{nl} = \text{const}\,\xi^l e^{-\xi/2} v(\xi), \qquad (38,18)$$

где полином $v(\xi)$ с коэффициентами, определяемыми рекуррентной формулой (38,13), совпадает с точностью до множителя с обобщенным полиномом Лагерра [1]). Поэтому в нашем случае радиальная функция приобретает вид

$$R_{nl} = A_{nl}\xi^l e^{-\xi/2} L_{n+l}^{2l+1}(\xi). \qquad (38,19)$$

Обобщенный полином Лагерра $L_n^m(\xi)$ выражается через производные от многочленов Лагерра, которые определяются соотношением

$$L_n(\xi) = e^{\xi}\frac{d^n}{d\xi^n}\left(e^{-\xi}\xi^n\right), \qquad (38,20)$$

так что

$$L_n^m(\xi) = \frac{d^m}{d\xi^m}L_n(\xi). \qquad (38,21)$$

Коэффициенты $A_{nl}$ (38,19) определяются из условия нормировки [2]). Радиальные волновые функции, принадлежащие, например, двум нижним уровням энергии, имеют вид

$$R_{10}(\rho) = 2\sqrt{\frac{Z^3}{a^3}}\,e^{-Z\rho}, \qquad (38,22)$$

$$R_{20}(\rho) = \sqrt{\frac{Z^3}{2a^3}}\,e^{-\frac{Z}{2}\rho}\left(1 - \frac{Z}{2}\rho\right), \qquad (38,23)$$

$$R_{21}(\rho) = \sqrt{\frac{Z^3}{6a^3}}\,e^{-\frac{Z}{2}\rho}\,\frac{Z}{2}\rho. \qquad (38,24)$$

---

[1]) См. сноску на стр. 143.

[2]) Вычисление нормировочного интеграла проведено, например, в книге Л. Д. Ландау и Е. М. Лифшиц, Квантовая механика, Физматгиз, 1963, стр. 150.

Здесь вместо $\xi$ введена опять переменная $\rho$ (см. (38,9)). Подчеркнем, что волновая функция полностью определяется совокупностью значений трех квантовых чисел: $n$, $l$ и $m$, тогда как уровни энергии (38,17) зависят только от главного квантового числа $n$. Таким образом, энергетические уровни атома водорода являются вырожденными. Мы видели в § 35, что вырождение по магнитному квантовому числу $m$ — общее свойство движения в поле с центральной симметрией. Однако в кулоновском поле уровни энергии оказываются вырожденными также и по азимутальному квантовому числу $l$. Это вырождение характерно только для движения в кулоновском поле. Достаточно слегка изменить закон сил, и энергия становится зависящей от азимутального квантового числа. Поэтому вырождение, характерное для кулоновского поля, получило название случайного вырождения. Найдем кратность вырождения $n$-го уровня энергии. Так как при заданном $n$ азимутальное квантовое число пробегает все целочисленные значения от 0 до $n-1$ и, в свою очередь, каждому $l$ соответствует $2l+1$ возможных значений квантового числа $m$, то кратность вырождения равна

$$\sum_{l=0}^{n-1}(2l+1)=n^2. \tag{38,25}$$

Каждому уровню энергии $E_n$ принадлежит $n^2$ различных волновых функций.

Рассмотрим более детально уровни энергии атома водорода. Они даются формулой (38,17), в которой нужно положить $Z=1$. Энергия основного состояния определяет потенциал ионизации атома водорода. Согласно квантовой теории света, разности энергетических состояний определяют частоты электромагнитных волн, излучаемых атомом (см. § 103):

$$\hbar\omega=E_m-E_n. \tag{38,26}$$

Величина $E_n/\hbar$ называется спектральным термом. Разности этих спектральных термов и определяют частоты излучения. Подставляя в формулу (38,26) выражение (38,17), получаем:

$$\nu=\frac{\omega}{2\pi}=R\left(\frac{1}{n^2}-\frac{1}{m^2}\right), \qquad m>n \tag{38,27}$$

Величина $R$ называется постоянной Ридберга

$$R=\frac{e^4\mu}{4\pi\hbar^3}=3{,}27\cdot 10^{15}\ сек^{-1}. \tag{38,28}$$

Все частоты, относящиеся к переходам на один и тот же нижний уровень, образуют спектральную серию. Так, если в формуле (38,27) положить $n=1$, то мы получим серию Лаймана. Она лежит в ультрафиолетовой части спектра. Переходы

на уровень $n = 2$ лежат в области видимой части спектра. Совокупность этих спектральных линий образует серию Бальмера. Спектральные серии, соответствующие переходам на уровни $n = 3$ и т. д., лежат в инфракрасной области спектра. Для водородоподобных ионов соответствующие спектральные линии сдвигаются в область более коротких длин волн, так как частоты возрастают в $Z^2$ раз.

Найдем, далее, вероятность (35,10) обнаружения электрона, находящегося в различных квантовых состояниях, на заданном расстоянии $r$ от ядра. Основное состояние электрона в атоме водорода описывается волновой функцией $\psi_{100} = R_{10}Y_{00}$. Угловая часть волновой функции сводится при $l=0$, $m=0$ к постоянной (см. § 30), т. е. состояние сферически-симметрично. Вероятность обнаружить электрон, находящийся в основном состоянии $\psi_{100}$, на заданном расстоянии от ядра дается выражением

$$dW_{10} = |\psi_{100}|^2 \, 4\pi r^2 \, dr.$$

Пользуясь (38,22), получаем

$$dW_{10} = \frac{4}{a^3} e^{-\frac{2r}{a}} r^2 \, dr. \qquad (38{,}29)$$

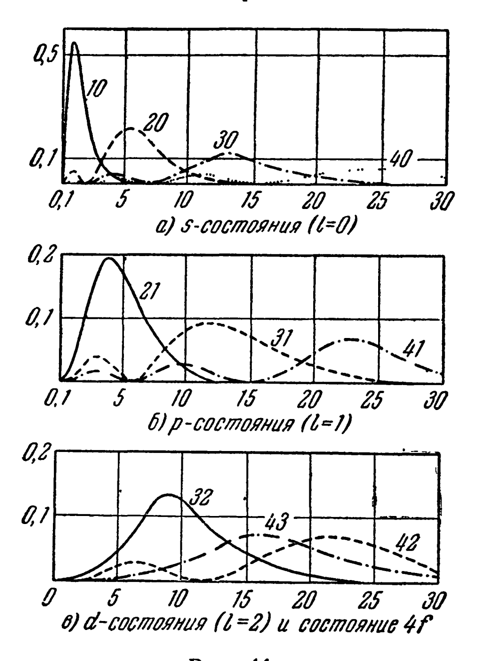



Рис. 11.

Мы видим, что эта вероятность отлична от нуля во всем пространстве, хотя и быстро падает с ростом $r$. Простое вычисление показывает, что кривая $dW_{10}/dr$ имеет максимум на расстоянии $r = a$, где величина $a$ определена формулой (38,3) и носит название боровского радиуса. Вид функции $|R_{nl}|^2 r^2$ для различных $n$ и $l$ приведен на рис. 11. По абсциссе отложено расстояние от центра $\rho = \frac{r}{a}$. По ординате — плотность вероятности $a^3 |R_{nl}|^2 \rho^2$. Отметим, что число нулей радиальной волновой функции $R_{nl}$ совпадает со значением радиального квантового числа $n_r$. На больших расстояниях радиальная волновая функция имеет вид

$$R_{nl}(r) \sim e^{-\frac{Zr}{na}} \left(\frac{2Zr}{na}\right)^{n-1} + \ldots \qquad (38{,}30)$$

Вычисленная с помощью этой функции плотность вероятности быстро спадает на расстояниях порядка $\frac{na}{Z}$. Отсюда видно, что величина $\frac{na}{Z}$ характеризует размеры атома, так как вероятность обнаружить электрон на бо́льших расстояниях весьма мала.

До сих пор мы рассматривали связанные состояния электрона в кулоновском поле ядра. В кулоновском поле в связанном состоянии могут находиться и другие отрицательно заряженные частицы, например $\pi$- и $\mu$-мезоны. Такие образования, как мы уже упоминали, получили название мезоатомов.

В качестве простейшего примера рассмотрим мезоатом водорода, или, как его называют, мезоводород. Уровни энергии мезоводорода и волновые функции мезона даются формулами (38,17), (38,18), (38,19), в которых, однако, приведенная масса электрона $\mu$ должна быть заменена на приведенную массу мезона $\mu'$. Эффективные размеры атома мезоводорода определяются величиной $a' = \frac{\mu}{\mu'} a$, которая существенно меньше эффективных размеров атома водорода. В частности, масса $\pi^-$-мезона равна 273 электронным массам и соответственно

$$a' \approx 0{,}2 \cdot 10^{-10} \; см.$$

В атоме мезоводорода $\pi$-мезон находится на значительно меньших расстояниях от ядра, чем электрон. Наличие ядерного взаимодействия $\pi$-мезона с ядром приводит к тому, что уровни энергии (38,17), полученные для чисто кулоновского поля, несколько смещаются. Экспериментальное исследование этого смещения позволяет сделать некоторые выводы о характере ядерного взаимодействия $\pi$-мезонов и нуклонов. Следует заметить, что время существования мезоатомов ограничено временем жизни самих мезонов. Как известно, мезоны являются нестабильными частицами, испытывающими распад с некоторым средним временем жизни $\tau$, характерным для данного сорта мезонов.

До сих пор мы ограничивались рассмотрением дискретного энергетического спектра, т. е. считали энергию отрицательной.

Рассмотрим теперь сплошной энергетический спектр $E > 0$, $\varepsilon = -\frac{E}{E_0} < 0$ (38,5). Введем обозначения с учетом (38,7), (38,9), (38,15)

$$\beta = \sqrt{2\varepsilon} = i\sqrt{2\frac{E}{E_0}} = ik; \quad n = \frac{Z}{\beta} = -i\frac{Z}{k}; \quad \xi = 2ik\rho. \quad (38{,}31)$$

Используя (38,7), (38,14) и (38,31), запишем радиальную волновую функцию непрерывного спектра в виде

$$R_{kl}=\frac{C_k}{(2l+1)!}(2k\rho)^l e^{-ik\rho}F\left(1+l+i\frac{Z}{k};\ 2l+2,\ 2ik\rho\right), \qquad (38,32)$$

здесь $C_k$ — нормировочный множитель.

Если функции $R_{kl}$ нормировать на $\delta$-функцию по $k$, то этот множитель равен

$$C_k=\sqrt{\frac{2}{\pi}}\,\frac{k}{Z}\,e^{\frac{\pi Z}{2k}}\left|\Gamma\left(l+1-\frac{iZ}{k}\right)\right|. \qquad (38,33)$$

Асимптотическое выражение радиальной волновой функции при больших $\rho$ определяется формулой [1])

$$R_{kl}\approx\sqrt{\frac{2}{\pi}}\,\frac{1}{Z\rho}\sin\left(k\rho+\frac{Z}{k}\ln 2k\rho-\frac{\pi}{2}l+\delta_l\right), \qquad (38,34)$$

где

$$\delta_l=\arg\Gamma\left(l+1-i\frac{Z}{k}\right)$$

($\Gamma$ — гамма-функция комплексного переменного. Ее аргумент равен $\delta_l$).

От общего асимптотического выражения радиальной волновой функции в центрально-симметричном поле (35,26) выражение волновой функции (38,34) (кулоновское поле) отличается наличием медленно возрастающего логарифмического члена в аргументе у синуса.

---

[1]) См. Л. Д. Ландау и Е. М. Лифшиц, Квантовая механика, Физматгиз, 1963, стр. 154; В. А. Фок, Начала квантовой механики, Кубуч, 1932, стр. 155.

ГЛАВА V

# КВАЗИКЛАССИЧЕСКОЕ ПРИБЛИЖЕНИЕ

## § 39. Предельный переход к классической механике

Мы неоднократно отмечали существование принципа соответствия и правила перехода соотношений квантовой механики в формулы классической механики при $\hbar \to 0$. Сейчас мы уточним условия этого перехода и вместе с тем получим важный приближенный метод решения уравнения Шредингера [1]) (метод ВКБ).

Если положить $\hbar = 0$ непосредственно в уравнении Шредингера

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U\right)\psi, \tag{39,1}$$

то оно теряет смысл. Поэтому, чтобы произвести указанный предельный переход, представим волновую функцию $\psi$ в виде

$$\psi = e^{\frac{i}{\hbar}S}. \tag{39,2}$$

Подставляя это выражение в уравнение (39,1), получаем уравнение для функции $S$:

$$-\frac{\partial S}{\partial t} = \frac{1}{2m}(\nabla S)^2 - \frac{i\hbar}{2m}\Delta S + U. \tag{39,3}$$

Формально разложим теперь функцию $S$ по степеням величины $\hbar/i$

$$S = S_0 + \left(\frac{\hbar}{i}\right) S_1 + \left(\frac{\hbar}{i}\right)^2 S_2 + \ \ldots \tag{39,4}$$

Подставляем разложение (39,4) в уравнение (39,3) и приравниваем коэффициенты при одинаковых степенях $\hbar$. С точностью до членов, пропорциональных первой степени величины $\hbar$,

---

[1]) Метод Вентцеля, Крамерса, Бриллюэна. G. Wentzel, Zeits, f. Physik **38**, 518 (1926); L. Brillouin, Comptes Rendus **183**, 24 (1926); J. de Physique **7**, 353 (1926); H. A. Kramers, Zeits, f. Physik **39**, 828 (1926); U. Jeffreys, Proc. London Math. Soc. (2) **23**, 428 (1923).

получаем два уравнения:

$$-\frac{\partial S_0}{\partial t}=\frac{1}{2m}(\nabla S_0)^2+U, \qquad (39,5)$$

$$-\frac{\partial S_1}{\partial t}=\frac{1}{m}\nabla S_0\nabla S_1+\frac{1}{2m}\Delta S_0. \qquad (39,6)$$

Уравнение (39,5) совпадает с уравнением Гамильтона — Якоби классической механики[1]) для функции действия $S_0$. Для выяснения смысла уравнения (39,6) напишем выражение для плотности вероятности нахождения частицы в данном месте пространства в виде

$$\rho=|\psi|^2=e^{2S_1}. \qquad (39,7)$$

Умножая (39,6) на $\rho$ и учитывая, что

$$\frac{\partial\rho}{\partial t}=2\frac{\partial S_1}{\partial t}\rho;\quad \nabla\rho=2\nabla S_1\rho,$$

получаем

$$-\frac{\partial\rho}{\partial t}=\frac{1}{m}(\nabla S_0\nabla\rho+\rho\Delta S_0)=\operatorname{div}\left(\frac{1}{m}\rho\nabla S_0\right). \qquad (39,8)$$

Уравнение (39,8), эквивалентное уравнению (39,6), представляет уравнение непрерывности. Оно показывает, что плотность вероятности перемещается в пространстве с такой же скоростью $\boldsymbol{v}=\frac{1}{m}\nabla S_0$ и по той же траектории, по которой перемещается частица в классической механике. Напомним, что, поскольку скорость направлена по нормали к поверхностям $S_0=$ $=\text{const}$, траектории классической частицы ортогональны к поверхностям $S_0=\text{const}$. В квазиклассическом приближении поверхности $S=\text{const}$ естественно назвать поверхностями равной фазы волновой функции.

Найдем теперь волновую функцию стационарных состояний частицы в квазиклассическом приближении, причем мы ограничимся одномерным движением, так что $\psi=\psi(x, t)$. В силу условия стационарности имеем

$$\psi(x, t)=e^{-\frac{i}{\hbar}Et}\psi(x). \qquad (39,9)$$

В соответствии с этим в формулах (39,2) и (39,4) полагаем

$$S_0(x, t)=-Et+S_0'(x), \qquad (39,10)$$

тогда как функции $S_1$, $S_2$, ... и т. д. можно считать не зависящими от времени.

[1]) Об уравнении Гамильтона — Якоби в классической механике см. Л. Д. Ландау и Е. М. Лифшиц, Механика, Физматгиз, 1958, стр. 184; Г. Голдстейн, Классическая механика, Гостехиздат, 1957, стр. 296.

Из уравнения (39,5) получаем

$$E = \frac{1}{2m}\left(\frac{dS_0'}{dx}\right)^2 + U(x), \tag{39,11}$$

откуда

$$S_0'(x) = \pm \int \sqrt{2m(E - U(x))}\, dx = \pm \int^x p(x)\, dx, \tag{39,12}$$

где

$$p(x) = \sqrt{2m(E - U(x))}.$$

Как и следовало ожидать, мы получили обычные формулы классической механики.

Из уравнения (39,6) мы можем теперь определить функцию $S_1$. Учитывая, что она постоянна во времени, находим

$$\frac{dS_0'}{dx}\frac{dS_1}{dx} + \frac{1}{2}\frac{d^2S_0'}{dx^2} = 0 \tag{39,13}$$

или

$$\frac{dS_1}{dx} = -\frac{1}{2}\frac{\dfrac{d^2S_0'}{dx^2}}{\dfrac{dS_0'}{dx}} = -\frac{1}{2p}\frac{dp}{dx}. \tag{39,14}$$

Интегрируя, получаем

$$S_1 = -\frac{1}{2}\ln p \tag{39,15}$$

(постоянную интегрирования мы учтем непосредственно в выражении для волновой функции).

Из определения (39,2) и из полученных выражений (39,10) и (39,15) легко найдем волновую функцию частицы с точностью до членов первого порядка по степеням $\hbar/i$:

$$\psi(x) = \frac{C_1}{\sqrt{p(x)}} e^{\frac{i}{\hbar}\int p(x)\,dx} + \frac{C_2}{\sqrt{p(x)}} e^{-\frac{i}{\hbar}\int p(x)\,dx}, \quad E > U, \tag{39,16}$$

$$\psi(x) = \frac{C_1'}{\sqrt{|p(x)|}} e^{\frac{1}{\hbar}\int |p(x)|\,dx} + \frac{C_2'}{\sqrt{|p(x)|}} e^{-\frac{1}{\hbar}\int |p(x)|\,dx}, \quad E < U. \tag{39,16'}$$

Характер полученной волновой функции существенно зависит от знака разности $(E - U)$. Если $E > U$, то импульс является вещественным. Это отвечает движению частицы в области, дозволенной по классической механике. При этом волновая функция имеет характер осциллирующей функции. Период осцилляции тем меньше, чем больше величина импульса $p$. Множитель $\frac{1}{\sqrt{p}} \sim \frac{1}{\sqrt{v}}$ имеет простой смысл. Вероятность

нахождения частицы в области от $x$ до $x+dx$ пропорциональна времени пребывания частицы в этой области $|\psi(x)|^2\,dx \sim \frac{dx}{v} \sim dt$, т. е. получается тот же результат, что и в классической механике. Совершенно иной характер имеет волновая функция в области недозволенных энергий, при $E < U$. Здесь импульс становится мнимым, а волновая функция превращается в сумму экспоненциальных выражений. В точке $E = U$ (именуемой точкой поворота) $p = 0$ и полученное выражение для волновой функции теряет смысл.

Как ясно из последующего, вблизи точки поворота квазиклассическое приближение становится неприменимым. Между тем, не зная волновую функцию в точке поворота, нельзя произвести смыкание волновой функции на границе дозволенной и недозволенной области. Иными словами, нельзя определить постоянные, фигурирующие в осциллирующем и экспоненциальном выражениях, без чего квазиклассические волновые функции не имеют никакой практической ценности. Однако прежде чем перейти к расчету волновой функции в точке поворота, следует выяснить, почему в этой точке квазиклассическое решение теряет смысл. Для этого оценим пределы применимости полученных выражений (39,16) и (39,16′). Прежде всего заметим, что при подстановке в уравнение (39,3) $S = S_0$ мы опустили, как малый, член $\frac{i\hbar}{2m}\Delta S_0$. Чтобы это было справедливо, должно выполняться неравенство

$$\left|\frac{i\hbar}{2m}\Delta S_0\right| \ll \frac{1}{2m}(\nabla S_0)^2, \qquad (39,17)$$

или, учитывая, что $\nabla S_0 = \boldsymbol{p}$,

$$\hbar\,|\nabla \boldsymbol{p}| \ll \boldsymbol{p}^2. \qquad (39,18)$$

Для одного измерения последнее неравенство перепишется в виде

$$\hbar\left|\frac{dp}{dx}\right| \ll p^2. \qquad (39,19)$$

Вводя вместо импульса $p$ волновое число $k$ и соответствующую длину волны $\lambda\!\!\!^{-} = \frac{\hbar}{p} = \frac{1}{k}$, имеем

$$\frac{d\lambda\!\!\!^{-}}{dx} \ll 1. \qquad (39,20)$$

Таким образом, мы видим, что уравнение Шредингера сводится к уравнениям (39,5), (39,6) при выполнении условия (39,20). Именно, для применимости квазиклассического приближения необходимо, чтобы длина волны де Бройля достаточно медленно изменялась в пространстве от точки к точке. Иными

словами, относительное изменение волнового числа на протяжении длины волны должно быть мало по сравнению с единицей $\lambda\!\!\!^{-}\frac{1}{k}\left|\frac{dk}{dx}\right| \ll 1$. Отметим также, что и относительное изменение производной от волнового числа $k$ на протяжении длины волны де Бройля для частицы должно быть мало. Действительно, при получении уравнений (39,5), (39,6) мы воспользовались также условием

$$\hbar\,|\Delta S_1| \ll |\Delta S_0|. \qquad (39,21)$$

Учитывая одномерность задачи и вводя волновое число $k$, перепишем это неравенство в виде

$$\left|\frac{d^2k}{dx^2}\right|\lambda\!\!\!^{-} \ll \left|\frac{dk}{dx}\right|. \qquad (39,22)$$

При движении частицы в потенциальном поле $U(x)$ удобно выразить волновое число через потенциальную энергию по формуле

$$k = \frac{p}{\hbar} = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E-U)}$$

и представить условие (39,20) в виде

$$\left|\frac{m\hbar}{p^3}\frac{dU}{dx}\right| \ll 1 \qquad (39,23)$$

или

$$\frac{m}{\hbar^2}\left|\lambda\!\!\!^{-3}\frac{dU}{dx}\right| \ll 1. \qquad (39,24)$$

Пользуясь (39,22), можно написать соответствующее неравенство и для второй производной от функции $U$. Отсюда видно, что квазиклассическое приближение справедливо:

1) когда длина волны де Бройля достаточно мала (т. е. частица является достаточно быстрой);

2) при достаточно медленном изменении потенциальной энергии от точки к точке, когда на длине порядка $\lambda\!\!\!^{-}$ не происходит заметного изменения импульса частицы.

Из (39,23) становится ясно, почему квазиклассическое выражение для волновой функции теряет смысл в точке поворота. Уже вблизи точки поворота импульс частицы становится малым и квазиклассическое приближение оказывается неприменимым.

Формулировки «достаточно мала» и «достаточно медленно» в 1) и 2) должны подчеркнуть то обстоятельство, что поскольку в критерии (39,20) — (39,24) входит масса частицы и конкретная характеристика поля — величина $dU/dx$, то в разных полях и для разных частиц квазиклассическое приближение будет справедливо при движении с различными энергиями. Для

качественных оценок можно переписать (39,20) в упрощенном виде. Именно, считая, что изменение длины волны происходит в области действия силового поля, имеющего конечную протяженность $a$, можно вместо (39,20) записать:

$$\lambda\!\!\!^{-} \ll a$$

или

$$E \gg \frac{\hbar^2}{2ma^2}. \qquad (39,25)$$

Для $\alpha$-частиц ($m = 6{,}7 \cdot 10^{-24}$ *г*) с энергией $E = 1$ *Мэв*, пролетающих через атомную оболочку ($a \sim 10^{-8}$ *см*), неравенство (39,25) выполняется в хорошем приближении. Напротив, для тех же $\alpha$-частиц с энергией 10 *Мэв*, испытывающих непосредственное соударение с ядром ($a \sim 10^{-13}$ *см*), квазиклассическое рассмотрение неприменимо. В области существенно больших энергий применение квазиклассического приближения оказывается возможным и при рассмотрении некоторых процессов, связанных с ядерными соударениями.

## § 40. Решение уравнения Шредингера вблизи точки поворота

Вернемся теперь к рассмотрению поведения волновой функции вблизи точки поворота.

Идея этого рассмотрения заключается в следующем: поскольку вблизи точки поворота квазиклассическое приближение оказывается неудовлетворительным, необходимо найти решение уравнения Шредингера, не используя это приближение. Возможность получения такого решения при произвольном виде потенциальной энергии связана с тем, что выражение для потенциальной энергии вблизи точки поворота допускает весьма существенное упрощение (см. ниже). Если искомое решение найдено, то следует определить его асимптотическое поведение на больших расстояниях по обе стороны от точки поворота, в тех областях, где уже справедливо квазиклассическое приближение. Потребовав совпадения квазиклассического решения с полученным асимптотическим выражением, мы сможем определить соответствующие постоянные.

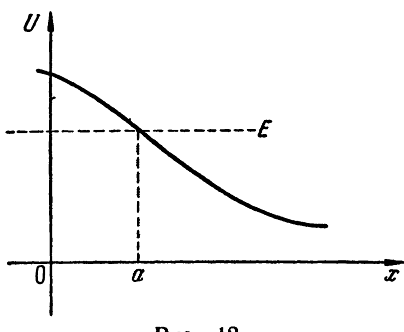


Рис. 12.

Переходя к реализации этой программы, заметим, что около точки поворота (рис. 12) можно разложить потенциальную

энергию $U(x)$ в ряд по малым отклонениям $\xi = x - a$ и ограничиться линейным членом в этом разложении. При этом мы предполагаем, что в точке поворота кривая $U(x)$ имеет плавный ход, как это изображено на рис. 12. Мы будем также считать, что область $x > a$ простирается до бесконечности. Вблизи точки $x = a$ можем записать:

$$U(x) = U(a) + \frac{dU}{dx}\Big|_{x=a}(x-a) + \ldots \qquad (40,1)$$

Потенциальная энергия в точке $a$ совпадает с полной энергией частицы $U(a) = E$. Обозначим через $f$ силу, действующую на частицу в точке поворота $f = -\frac{dU}{dx}\Big|_{x=a}$, и введем новую переменную $\xi = x - a = \frac{E-U}{f}$. Уравнение Шредингера вблизи точки $x = a$ запишем как

$$\frac{d^2\psi}{d\xi^2} + f\frac{2m}{\hbar^2}\xi\psi = 0. \qquad (40,2)$$

Уравнение Шредингера такого вида было нами рассмотрено в § 13. Уравнение (40,2) совпадает с уравнением (13,5) при $E = 0$. Следовательно, волновая функция, удовлетворяющая уравнению (40,2) и условию конечности при $\xi \to \pm\infty$, выражается через функцию Эйри. Мы воспользуемся сразу асимптотическими выражениями (13,9) и (13,10). Это означает, что рассматриваются значения $\xi$, достаточно большие, чтобы можно было пользоваться асимптотическими выражениями, и в то же время такие, что разложение (40,1) еще применимо. В полях, удовлетворяющих условию квазиклассичности, такая область, как правило, существует.

Соответственно в области $x \gg a$ решение уравнения (40,2) имеет вид

$$\psi = \frac{2C}{(2mf\xi)^{1/4}}\sin\left(\frac{2}{3\hbar}\sqrt{2mf}\,\xi^{3/2} + \frac{\pi}{4}\right), \qquad (40,3)$$

где $2C$ — постоянная нормировки.

Импульс $p$ при движении в поле (40,1) имеет вид

$$p = \sqrt{2m(E-U)} = \sqrt{2mf\xi}. \qquad (40,4)$$

Выразим через переменную $\xi$ действие

$$\int_a^x p\,dx = \int_0^\xi p\,d\xi = \sqrt{2mf}\int_0^\xi \xi^{1/2} = \frac{2}{3}\sqrt{2mf}\,\xi^{3/2}. \qquad (40,5)$$

Пользуясь (40,5), мы можем представить волновую функцию (40,3) в виде

$$\psi(x)=\frac{2C}{\sqrt{p}}\sin\left(\frac{1}{\hbar}\int_a^x p\,dx+\frac{\pi}{4}\right)=\frac{2C}{\sqrt{p}}\cos\left(\frac{1}{\hbar}\int_a^x p\,dx-\frac{\pi}{4}\right). \quad (40,6)$$

Мы видим, что функция (40,6) имеет квазиклассический вид [см. (39,16)].

Найдем теперь функцию в области $x \ll a$. Пользуясь опять асимптотическим выражением (13,9) и выражениями (40,4), (40,5), имеем

$$\psi=\frac{C}{(2mf\xi)^{1/4}}\exp\left(-\frac{2}{3\hbar}\sqrt{2mf}\,|\xi|^{3/2}\right)=\frac{C}{\sqrt{|p|}}\exp\left(-\frac{1}{\hbar}\int_x^a |p|\,dx\right), \quad (40,7)$$

где $C$ — та же нормировочная постоянная, что и в формуле (40,6). Таким образом, мы получили выражение для квазиклассической волновой функции, справедливой слева и справа от точки поворота $x=a$.

Выпишем окончательно выражения квазиклассической волновой функции:

$$\psi(x)=\begin{cases} C\dfrac{1}{\sqrt{|p|}}e^{-\frac{1}{\hbar}\int_x^a |p|\,dx} & (x<a),\\[2ex] 2C\dfrac{1}{\sqrt{p}}\cos\left(\dfrac{1}{\hbar}\displaystyle\int_a^x p\,dx-\dfrac{\pi}{4}\right) & (x>a).\end{cases} \quad (40,8)$$

Постоянная $C$ определяется из условия нормировки.

Аналогичным образом, если разрешенная область лежит слева от точки поворота $b$, т. е. $U(x)<E$ при $x<b$ и $U(x)>E$ при $x>b$, то волновая функция запишется в виде

$$\psi(x)=\begin{cases} C'\dfrac{1}{\sqrt{|p|}}e^{-\frac{1}{\hbar}\int_b^x |p|\,dx} & (x>b),\\[2ex] 2C'\dfrac{1}{\sqrt{p}}\cos\left(\dfrac{1}{\hbar}\displaystyle\int_x^b p\,dx-\dfrac{\pi}{4}\right) & (x<b).\end{cases} \quad (40,9)$$

Итак, нами найдена в квазиклассическом приближении функция $\psi(x)$, удовлетворяющая уравнению Шредингера. Полученное решение не является еще полным, поскольку линейное

уравнение второго порядка имеет два линейно независимых решения. В случае волновой функции, зависящей от одной независимой переменной, второе решение уравнения Шредингера может быть легко получено. Именно, если $\psi_1$ и $\psi_2$ — две линейно независимые функции, удовлетворяющие одномерному уравнению Шредингера и отвечающие энергии $E$, то они всегда связаны соотношением

$$\frac{1}{\psi_1}\frac{d^2\psi_1}{dx^2}=\frac{1}{\psi_2}\frac{d^2\psi_2}{dx^2}=\frac{2m}{\hbar^2}(U-E). \tag{40,10}$$

Интегрируя, получаем

$$\psi_2\frac{d\psi_1}{dx}-\psi_1\frac{d\psi_2}{dx}=\text{const}. \tag{40,11}$$

Решение, линейно независимое от (40,8), ищем в виде

$$\psi(x)=\begin{cases} B_1\dfrac{1}{\sqrt{|p|}}e^{\frac{1}{\hbar}\int\limits_x^a |p|\,dx} & (x<a),\\ B_2\dfrac{1}{\sqrt{p}}\cos\left(\dfrac{1}{\hbar}\int\limits_a^x p\,dx+\alpha\right) & (x>a).\end{cases} \tag{40,12}$$

Выражения (40,8) и (40,12) следует подставить в соотношение (40,11). При этом в силу неравенства (39,20) достаточно ограничиться дифференцированием по аргументам экспоненциальной и тригонометрической функций. Приравнивая выражения, получаемые при $x<a$ и $x>a$, находим

$$B_1=B_2\sin\left(\frac{\pi}{4}+\alpha\right).$$

Окончательно полагаем:

$$B_1=B_2,\quad \alpha=\frac{\pi}{4}.$$

Таким образом, решение, линейно независимое от (40,8), может быть выбрано в виде

$$\psi(x)=\begin{cases} B\dfrac{1}{\sqrt{|p|}}e^{\frac{1}{\hbar}\int\limits_x^a |p|\,dx} & (x<a),\\ B\dfrac{1}{\sqrt{p}}\cos\left(\dfrac{1}{\hbar}\int\limits_a^x p\,dx+\dfrac{\pi}{4}\right) & (x>a).\end{cases} \tag{40,13}$$

Соответственно решение, линейно независимое от (40,9), напишется как

$$\psi(x)=\begin{cases} B'\dfrac{1}{\sqrt{|p|}}e^{\frac{1}{\hbar}\int\limits_b^x |p|\,dx} & (x>b), \\ B'\dfrac{1}{\sqrt{p}}\cos\left(\dfrac{1}{\hbar}\int\limits_x^b p\,dx+\dfrac{\pi}{4}\right) & (x<b). \end{cases} \tag{40,14}$$

Полученные выражения будут непригодными в том случае, когда в точке поворота, например, точке $b$, потенциальная энергия скачком обращается в бесконечность. В этом случае в области $x \geqslant b$, $\psi=0$. Фаза волновой функции при $x<b$ может быть определена, если условия применимости квазиклассического приближения (39,20) остаются справедливыми вплоть до точки $x=b$. При этом, учитывая, что $\psi(b)=0$, получаем

$$\psi(x)=A\frac{1}{\sqrt{p}}\sin\left(\frac{1}{\hbar}\int\limits_x^b p\,dx\right). \tag{40,15}$$

## § 41. Движение в потенциальной яме в квазиклассическом приближении

Применим полученные результаты к движению частицы в потенциальной яме. При этом мы найдем приближенную формулу для спектра энергии. Ее сравнение с точными формулами позволит нам наглядно судить о степени точности и достоинствах квазиклассического приближения. Наряду с этим решение поставленной задачи представляет большой интерес в другом отношении. Оно позволяет выяснить связь между квантовой механикой и старой теорией Бора.

Рассмотрим, прежде всего, потенциальную яму с бесконечно высокими стенками (см. § 8). Волновая функция в квазиклассическом приближении дается формулой типа (40,15). Именно

$$\psi(x)=A\frac{1}{\sqrt{p}}\sin\left(\frac{1}{\hbar}\int\limits_x^b p\,dx\right). \tag{41,1}$$

В потенциальной яме будет две точки поворота $a$ и $b$, в которых волновая функция должна обращаться в нуль. Таким образом, в обоих точках поворота должно выполняться условие $\psi=0$ или

$$\frac{A}{\sqrt{p}}\sin\left(\frac{1}{\hbar}\int\limits_a^b p\,dx\right)=0. \tag{41,2}$$

Это условие выполнено, если

$$\frac{1}{\hbar}\int_a^b p\,dx = n\pi, \tag{41,3}$$

где $n$ — целые положительные числа, начиная с единицы. Поскольку импульс постоянен и равен $\sqrt{2mE}$, находим

$$E = \frac{\hbar^2\pi^2}{2ml^2}n^2, \tag{41,4}$$

где $l = b - a$ — ширина ямы.

Мы видим, что в простейшем случае бесконечно глубокой потенциальной ямы квазиклассическое приближение приводит к точному выражению для энергетического спектра (см. § 8).

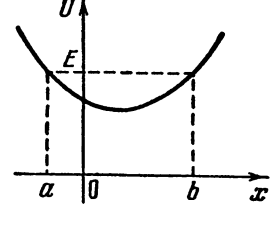


Рис. 13.

Рассмотрим теперь общий случай потенциальной ямы, изображенной на рис. 13. Мы будем считать, что запрещенная область простирается справа и слева от точек поворота как угодно далеко. При этом квазиклассическая волновая функция не будет содержать экспоненциально возрастающих слагаемых и дается формулами типа (40,8) или (40,9). Обе волновые функции, (40,8) и (40,9), описывающие движение частицы в яме, должны быть тождественными выражениями

$$2C\frac{1}{\sqrt{p}}\cos\left(\frac{1}{\hbar}\int_a^x p\,dx - \frac{\pi}{4}\right) = 2C'\frac{1}{\sqrt{p}}\cos\left(\frac{1}{\hbar}\int_x^b p\,dx - \frac{\pi}{4}\right)$$

$$(a < x < b). \tag{41,5}$$

Последнее возможно лишь в том случае, если сумма обеих фаз равна целому кратному $\pi$

$$\frac{1}{\hbar}\int_a^b p\,dx - \frac{\pi}{2} = n\pi, \tag{41,6}$$

где $n$ — целое число. При этом

$$C' = (-1)^n C. \tag{41,7}$$

Если ввести интеграл по периоду классического движения частицы от $a$ до $b$ и обратно $\int_a^b p\,dx = \frac{1}{2}\oint p\,dx$, то из (41,6)

получаем

$$\oint p\,dx = 2\pi\hbar\left(n+\frac{1}{2}\right). \tag{41,8}$$

Последнее выражение представляет не что иное, как правило квантования Бора, из которого определяются стационарные состояния частицы в квазиклассическом случае. Таким образом, теория Бора с ее непоследовательным наложением условий квантования на чисто классические величины оказывается совершенно правильной в пределах квазиклассического приближения. Отметим, что число $n$ равно числу корней квазиклассической волновой функции между точками поворота $a$ и $b$, так как при изменении $x$ от $a$ до $b$ фаза волновой функции возрастает от $-\pi/4$ до $\left(n+\frac{1}{2}\right)\pi-\frac{\pi}{4}$ и, следовательно, косинус $n$ раз обращается в нуль. Чем больше квантовое число $n$, т. е. чем меньше соответственно длина волны де Бройля, тем лучше условия применимости квазиклассического приближения (39,20). Мы должны ожидать, следовательно, что уровни энергии, полученные из условия (41,8), совпадают при больших числах $n$ с их точными значениями, вычисленными из решения уравнения Шредингера. В некоторых случаях однако, как, например, для гармонического осциллятора, формула (41,8) дает правильное значение уровней энергии при любых числах $n$. Интеграл, стоящий в левой части уравнения (41,8), представляет площадь, охватываемую классической фазовой траекторией частицы с энергией $E$ на ее фазовой плоскости. Согласно (41,8), эта площадь при $n \gg 1$ равна $2\pi\hbar n$. Поскольку каждому узлу волновой функции отвечает некоторый уровень энергии системы, число $n$ дает нам число состояний с энергиями меньшими или равными $E$. Таким образом, на одно квантовое состояние в фазовой плоскости приходится площадь, равная $2\pi\hbar$. Число состояний, отвечающих площади на фазовой плоскости $\Delta p\,\Delta x$, будет равно

$$\frac{\Delta p\,\Delta x}{2\pi\hbar}. \tag{41,9}$$

Обобщая эту формулу на трехмерный случай, очевидно, получим число состояний, отвечающих объему $\Delta x\,\Delta y\,\Delta z\,\Delta p_x\,\Delta p_y\,\Delta p_z$ в фазовом пространстве

$$\frac{\Delta x\,\Delta y\,\Delta z\,\Delta p_x\,\Delta p_y\,\Delta p_z}{(2\pi\hbar)^3}. \tag{41,10}$$

Эта формула была положена в основу нашего изложения статистической физики. Мы видим, что квазиклассическое приближение представляет как бы мост, соединяющий классическую и квантовую механику. Оно позволяет понять смысл теории Бора и принципа соответствия и дает возможность устра-

нить все кажущиеся противоречия между различными сторонами поведения реальных частиц. С помощью квазиклассического приближения мы можем непосредственно проследить за тем, при каких условиях и с какой степенью точности можно перейти к классическому описанию движения частиц в тех или иных задачах.

Вместе с тем оно дает сравнительно простой способ приближенного описания квантовых систем, в частности частиц высокой энергии, нахождения энергетических уровней и т. п.

## § 42. Прохождение через потенциальный барьер

В § 13 мы рассмотрели прохождение микрочастицы через прямоугольный потенциальный барьер. В этом параграфе мы получим более общие формулы для случая прохождения частиц через потенциальные барьеры произвольной формы (рис. 14). Мы будем предполагать, что энергии частиц $E$ достаточно велики, а ход потенциальной энергии является достаточно плавным для того, чтобы во всем пространстве, за исключением лишь небольших областей около точек поворота $a$ и $b$, были выполнены условия применимости квазиклассического приближения. Пусть частица падает на барьер, двигаясь слева направо вдоль оси $x$. Тогда в области за точкой поворота $a$, т. е. при $x > a$, должна существовать только волна, распространяющаяся в положительном направлении оси $x$ (в этой области нет отраженной волны). Квазиклассическая волновая функция при $x > a$ может быть взята в виде суперпозиции выражений (40,8) и (40,13)

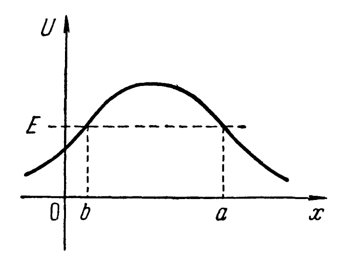


Рис. 14.

$$\psi(x) = 2C \frac{1}{\sqrt{p}} \cos\left(\frac{1}{\hbar}\int_a^x p\,dx - \frac{\pi}{4}\right) + B\frac{1}{\sqrt{p}}\cos\left(\frac{1}{\hbar}\int_a^x p\,dx + \frac{\pi}{4}\right). \tag{42,1}$$

Поскольку на больших расстояниях от точки $a$ импульс $p$ изменяется мало, каждое слагаемое в (42, 1) является наложением двух плоских волн, распространяющихся в противоположных направлениях. Легко видеть, что суперпозиция (42,1) описывает волну, распространяющуюся слева направо лишь при условии

$$B = -2Ci.$$

При этом

$$\psi=\frac{2C}{\sqrt{p}}e^{i\left(\frac{1}{\hbar}\int\limits_a^x p\,dx-\frac{\pi}{4}\right)}\qquad (x>a). \tag{42,2}$$

Найдем квазиклассическую волновую функцию в области $b<x<a$. Беря суперпозицию (40,8) и (40,13) и учитывая найденное соотношение между $B$ и $C$, получаем

$$\psi(x)=C\left\{\frac{1}{\sqrt{|p|}}e^{-\frac{1}{\hbar}\int\limits_x^a |p|\,dx}+\frac{2}{i\sqrt{|p|}}e^{\frac{1}{\hbar}\int\limits_x^a |p|\,dx}\right\}\qquad (b<x<a). \tag{42,3}$$

Это соотношение удобно переписать в виде

$$\psi(x)=C\frac{1}{\sqrt{|p|}}\left\{e^{-L}e^{\frac{1}{\hbar}\int\limits_b^x |p|\,dx}-2ie^{L}e^{-\frac{1}{\hbar}\int\limits_b^x |p|\,dx}\right\}\qquad (b<x<a), \tag{42,4}$$

где

$$L=\frac{1}{\hbar}\int\limits_b^a |p|\,dx.$$

Пользуясь теперь соотношениями (40,9) и (40,14), не представляет труда получить выражение для волновой функции в области перед барьером

$$\begin{aligned}\psi(x)&=\frac{4C}{i\sqrt{p}}e^{L}\cos\left(\frac{1}{\hbar}\int\limits_x^b p\,dx-\frac{\pi}{4}\right)+\\&\quad+C\frac{1}{\sqrt{p}}e^{-L}\cos\left(\frac{1}{\hbar}\int\limits_x^b p\,dx+\frac{\pi}{4}\right)=\\&=\frac{2C}{i\sqrt{p}}\left\{\left(e^{L}-\frac{1}{4}e^{-L}\right)e^{i\left(\frac{1}{\hbar}\int\limits_x^b p\,dx-\frac{\pi}{4}\right)}+\right.\\&\quad\left.+\left(e^{L}+\frac{1}{4}e^{-L}\right)e^{-i\left(\frac{1}{\hbar}\int\limits_x^b p\,dx-\frac{\pi}{4}\right)}\right\}\qquad (x<b).\end{aligned} \tag{42,5}$$

Итак, мы представили волновую функцию в области перед барьером в виде суперпозиции падающей и отраженной волн. Определим теперь коэффициент прохождения $D$ частиц через

барьер. Пользуясь (42,2), вычисляем плотность потока частиц, прошедших через барьер $j_{пр}$

$$j_{пр} = 4\,|C\,|^2 \frac{1}{m}. \tag{42,6}$$

Плотность потока падающих частиц в соответствии с (42,5) равна

$$j_{пад} = 4\,|C\,|^2 \frac{1}{m}\left(e^{L} + \frac{1}{4}e^{-L}\right)^2. \tag{42,7}$$

Следовательно, для коэффициента прохождения $D$ получаем следующее выражение:

$$D = \frac{j_{пр}}{j_{пад}} = \frac{e^{-2L}}{\left(1 + \frac{1}{4}e^{-2L}\right)^2}. \tag{42,8}$$

Для достаточно широкого потенциального барьера $e^{-2L} \ll 1$, и мы получаем

$$D = e^{-2L} = e^{-\frac{2}{\hbar}\int\limits_a^b p\,dx}. \tag{42,9}$$

Отметим, что если потенциальная энергия с одной стороны барьера меняется достаточно быстро, так что квазиклассическое приближение неприменимо, то в выражении (42,9) появится предэкспоненциальный множитель. Однако основной экспоненциальный множитель не меняется. Формула (42,9) широко применяется в квантовой механике для вычисления вероятностей прохождения частиц через потенциальные барьеры.

В виде примера рассмотрим теорию $\alpha$-распада. Хорошо известно, что все тяжелые ядра с массовыми числами порядка двухсот оказываются нестабильными по отношению к $\alpha$-распаду. Вероятность распада сильно зависит от энергии вылетающих $\alpha$-частиц и изменяется в очень широких пределах. Так, если вероятность распада характеризовать периодом полураспада $\tau$, то у $Po^{234}$, испускающего $\alpha$-частицы с энергией 7,8 *Мэв*, $\tau$ равно $1{,}6 \cdot 10^{-4}$ *сек*, а у $Th^{232}$ при энергии $\alpha$-частиц, равной 4 *Мэв*, $\tau$ равно $1{,}4 \cdot 10^{10}$ лет. Такая резкая зависимость вероятности $\alpha$-распада от энергии объясняется тем, что частица для вылета из ядра должна пройти через потенциальный барьер [1]). Действительно, упрощая рассмотрение, мы можем предположить, что исходное ядро уже содержит готовую $\alpha$-частицу. При этом задача сводится к вычислению вероятности того, что $\alpha$-частица покинет исходное, материнское ядро.

---

[1]) R. Gurney, E. Condon, Nature **122**, 439 (1928); Phys. Rev. **33**, 127 (1929).

Обозначим через $U(r)$ энергию взаимодействия $\alpha$-частицы с оставшимся дочерним ядром. На малых расстояниях $U(r)$ сводится к потенциалу ядерных сил, который мы будем считать постоянным и равным $U_0$, а на больших расстояниях — к кулоновскому взаимодействию $\alpha$-частицы и оставшегося ядра (рис. 15)

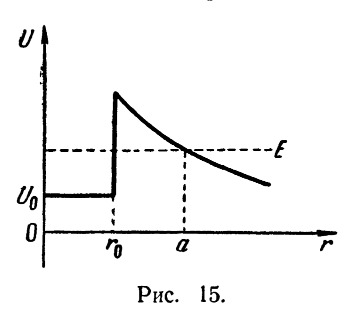


Рис. 15.

$$U(r)=\begin{cases}\dfrac{2Ze^2}{r} & (r>r_0),\\ U_0 & (r\leqslant r_0),\end{cases}$$

где $r_0$ — расстояние порядка размера ядра.

Воспользовавшись формулой (42,9), мы можем найти для $\alpha$-частиц вероятность прохождения через потенциальный барьер. То обстоятельство, что формула (42,9) выведена для одномерного движения, здесь не существенно, как так мы установили в § 35, что радиальное движение сводится к одномерному с некоторой эффективной потенциальной энергией.

Для простоты мы рассмотрим случай, когда $l=0$, так что центробежная энергия в расчеты не войдет (см. также следующий параграф). Тогда имеем

$$D=\exp\left\{-\frac{2}{\hbar}\int\limits_{r_0}^{a}\sqrt{2\mu\left(\frac{2Ze^2}{r}-E\right)}\,dr\right\}=e^{-2L}, \qquad (42,10)$$

где точка поворота $a$ определяется условием $a=\dfrac{2Ze^2}{E}$, а $\mu$ — приведенная масса $\alpha$-частицы и дочернего ядра. Вычислим интеграл $L$:

$$L=\sqrt{\frac{4\mu Ze^2}{\hbar^2}}\int\limits_{r_0}^{a}\sqrt{1-\frac{E}{U_{\text{макс}}}\frac{r}{r_0}}\,\frac{dr}{\sqrt{r}},$$

где

$$U_{\text{макс}}=\frac{2Ze^2}{r_0}.$$

Произведя замену переменных $\sqrt{\dfrac{E}{U_{\text{макс}}}\dfrac{r}{r_0}}=\sin\alpha$, легко получим:

$$L=\frac{2Ze^2}{\hbar v}(\pi-2\alpha_0-\sin 2\alpha_0), \qquad (42,11)$$

где

$$\sin\alpha_0=\sqrt{\frac{E}{U_{\text{макс}}}}$$

и $v=\sqrt{2E/\mu}$ — скорость $\alpha$-частицы, если пренебречь отличием приведенной массы $\mu$ от массы $\alpha$-частицы. Таким образом, вероятность прохождения $\alpha$-частицы через барьер дается выражением

$$D=\exp\left\{-\frac{4Ze^2}{\hbar v}(\pi-2\alpha_0-\sin 2\alpha_0)\right\}. \qquad (42,12)$$

Вероятность $\alpha$-распада $\lambda$ мы получим, если умножим вероятность $D$ прохождения через барьер на вероятность $\alpha$-распада при отсутствии барьера $\nu$

$$\lambda=\nu D.$$

Величину $\nu$ трудно вычислить сколько-нибудь точно. Существенно, однако, что очень сильная зависимость вероятности распада от энергии $\alpha$-частицы заключена в множителе $D$. Качественно эта зависимость хорошо подтверждается экспериментом.

Заметим, наконец, что подобные же рассуждения применимы и к случаю спонтанного деления тяжелых ядер.

## § 43. Квазиклассическое движение в центрально-симметричном поле

Определим приближенное выражение для радиальной составляющей волновой функции $R(r)$ или функции $\chi(r)=rR$ при условии, что потенциальная энергия $U(r)$ удовлетворяет условию квазиклассичности. При этом мы можем воспользоваться уже выведенными соотношениями, поскольку функция $\chi(r)$, как мы знаем (см. § 35), описывается одномерным волновым уравнением Шредингера с эффективной потенциальной энергией

$$U_{\text{эфф}}(r)=U(r)+\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}.$$

При этом нужно, конечно, учитывать, что координата $r$, в отличие от $x$, меняется от 0 до $\infty$. При $l=0$ имеем $U_{\text{эфф}}(r)=U(r)$. Если условия квазиклассичности выполняются вплоть до точки $r=0$, то соответствующая волновая функция легко может быть получена. Действительно, условие конечности волновой функции в нуле дает $\chi(0)=0$ и, пользуясь (40,27), получаем:

$$\chi(r)=C\frac{1}{\sqrt{2m(E-U(r))}}\sin\left(\frac{1}{\hbar}\int\limits_0^r\sqrt{2m(E-U(r))}\,dr\right). \qquad (43,1)$$

В более общем случае $l\neq 0$ условию квазиклассичности должна удовлетворять эффективная потенциальная энергия $U_{\text{эфф}}(r)$. Если считать, что на малых расстояниях основную роль

играет центробежная энергия $\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}$ и $p \sim \frac{\hbar l}{r}$, то из условия (39,20) следует $l \gg 1$. Соответствующая волновая функция при $r \gg a$, где $a$ — точка поворота, может быть написана в виде (40,20) при условии, однако, что в центробежной энергии величина $l(l+1)$ заменена на $\left(l+\frac{1}{2}\right)^2$ [1]):

$$\chi(r) = \frac{A}{\sqrt{p_r}} \cos\left(\frac{1}{\hbar}\int_a^r p_r\,dr - \frac{\pi}{4}\right), \tag{43,2}$$

где

$$p_r = \sqrt{2m\left(E - U(r) - \frac{\hbar^2\left(l+\frac{1}{2}\right)^2}{2mr^2}\right)}. \tag{43,3}$$

Таким образом, к центробежной энергии добавлен член $\hbar^2/8mr^2$. Эта добавка приводит к более правильному значению фазы волновой функции. Так, для свободного движения $U = 0$ формула (43,2) дает для фазы волновой функции на больших расстояниях значение, полученное нами в § 35.

[1]) H. A. Kramers, Zeits. f. Physik 39, 828 (1926).

ГЛАВА VI

# МАТРИЧНАЯ ФОРМА КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

## § 44. Операторы и матрицы

Развитый в предыдущих главах расчетный метод квантовой механики — метод линейных эрмитовых операторов, не является единственным расчетным аппаратом, применяемым в квантовой механике. Оказалось, что наряду с операторами всем механическим величинам в квантовой механике можно сопоставить так называемые эрмитовы матрицы. Под матрицей $R$ понимают совокупность величин, образующих таблицу

$$R = \begin{Vmatrix} R_{11} & R_{12} \ldots R_{1n} \\ R_{21} & R_{22} \ldots R_{2n} \\ \vdots & \vdots \\ R_{n1} & R_{n2} \ldots R_{nn} \end{Vmatrix}. \tag{44,1}$$

Число строк и столбцов в таблице может в общем случае не совпадать. Каждая из величин (вообще говоря комплексных), стоящих в таблице, носит название матричного элемента. Матричный элемент имеет два индекса — первый означает номер строки, второй — номер столбца. Понятие о матрицах обычно вводится в связи с линейным преобразованием векторов в пространстве $n$-измерений [1]).

Несколько ниже мы увидим, что в квантовой механике имеется возможность геометрической интерпретации волновой функции, как вектора в некотором воображаемом пространстве. Пока же при помощи весьма общего рассуждения убедимся, что каждому линейному оператору $\hat{F}$ может быть сопоставлена матрица $F$ с определенными значениями матричных элементов.

Задание оператора означает, что задан результат действия

[1]) См. более подробно В. И. Смирнов, Курс высшей математики, т. III, ч. 1, Физматгиз, 1958, стр. 95.

его на функцию $\psi(x)$

$$\hat{R}\psi(x) = \varphi(x). \tag{44,2}$$

Перейдем от $x$-представления к $F$-представлению. Для этого разложим функции $\psi(x)$ и $\varphi(x)$ по собственным функциям $\psi_m(x)$ оператора $\hat{F}$. Будем предполагать, что оператор $\hat{F}$ обладает дискретным спектром. Например, представлением такого рода может быть энергетическое представление ($E$-представление)

$$\left.\begin{aligned} \psi(x) &= \sum_m c_m \psi_m(x), \\ \varphi(x) &= \sum_n b_n \psi_n(x). \end{aligned}\right\} \tag{44,3}$$

Совокупность амплитуд $c_m$ (или $b_n$) определяет волновую функцию $\psi$ (или $\varphi$) в $F$-представлении. Иногда эту совокупность удобно обозначать в виде столбца

$$c = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \end{pmatrix}; \quad b = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \end{pmatrix}. \tag{44,4}$$

Разложение (44,3) подставляем в (44,2). Получаем

$$\sum_n b_n \psi_n(x) = \sum_m c_m \hat{R}\psi_m(x).$$

Умножая левую и правую части этого равенства на $\psi_l^*(x)$ и интегрируя по всей области изменения независимых переменных, найдем

$$b_l = \sum_m R_{lm} c_m, \tag{44,5}$$

где

$$R_{lm} = \int \psi_l^*(x)\, \hat{R}\psi_m(x)\, dV. \tag{44,6}$$

Соотношение (44,5) определяет непосредственно в $F$-представлении преобразование функции $\psi$ в функцию $\varphi$ под действием оператора $\hat{R}$. Оператор $\hat{R}$ в этом представлении дается формулой (44,6), т. е. в виде матрицы. Таким образом, задание матрицы $R$ эквивалентно заданию самого оператора $\hat{R}$.

Матричный элемент $R_{ik}$ иногда называют матричным элементом, отвечающим переходу из $k$-го состояния в $i$-е состояние. Такая терминология основана на следующем рассуждении. Предположим, что исходным состоянием системы является $k$-е состояние $\psi(x) = \psi_k(x)$. При действии оператора $\hat{R}$ имеет место

преобразование (44,2). Пользуясь (44,3), (44,5) и учитывая, что в данном случае $c_m = \delta_{mk}$, $b_n = R_{nk}$, получаем

$$\varphi(x) = \hat{R}\psi_k = \sum_n b_n\psi_n = \sum_n R_{nk}\psi_n(x), \tag{44,7}$$

и следовательно квадрат модуля матричного элемента $R_{ik}$ определяет вероятность нахождения системы в $i$-м состоянии.

Зная матрицу, отвечающую величине $R$, не представляет труда найти и среднее значение этой величины в некотором состоянии $\psi$. По общей формуле (22,4) имеем

$$\overline{R} = \int \psi^*\hat{R}\psi\,dV.$$

Подставляя сюда вместо $\psi$ разложение (44,3), получаем

$$\overline{R} = \sum_m\sum_n c_m^* c_n \int \psi_m^*\hat{R}\psi_n\,dV = \sum_m\sum_n c_m^* R_{mn} c_n. \tag{44,8}$$

Заметим, что если мы определим матричные элементы (44,6) с помощью волновых функций $\psi_m$, которые являются собственными функциями оператора $\hat{R}$, то мы тем самым определим матрицу оператора $R$ в собственном представлении

$$R_{ml} = \int \psi_m^*\hat{R}\psi_l\,dV = R_l \int \psi_m^*\psi_l\,dV = R_l\delta_{ml}. \tag{44,9}$$

Мы видим, что в этом случае отличны от нуля лишь матричные элементы с $m = l$. Матрицы такого вида называются диагональными

$$R = \begin{Vmatrix} R_{11} & 0 & 0 & \dots \\ 0 & R_{22} & 0 & \dots \\ 0 & 0 & R_{33} & \dots \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \end{Vmatrix}. \tag{44,10}$$

Таким образом, в своем собственном представлении любой оператор изображается диагональной матрицей, причем диагональные элементы равны собственным значениям этого оператора.

Задание матричных элементов $R_{ml}$ полностью эквивалентно заданию оператора $\hat{R}$. Оно позволяет определить, как мы увидим, собственные значения и собственные функции этого оператора. С другой стороны, если известен оператор $\hat{R}$, то могут быть определены и матричные элементы $R_{ml}$.

Эрмитовость оператора $\hat{R}$ налагает известное ограничение на вид матричных элементов $R_{ml}$. Именно, для матричного элемента $R_{ml}^*$, комплексно сопряженного элементу $R_{ml}$, имеем

$$R_{ml}^* = \left(\int \psi_{ml}^*\hat{R}\psi_l\,dV\right)^* = \int \psi_m\hat{R}^*\psi_l^*\,dV.$$

По определению эрмитового оператора

$$\int \psi_m \hat{R}^* \psi_l^* dV = \int \psi_l^* \hat{R} \psi_m \, dV,$$

так что

$$R_{ml}^* = R_{lm}.$$

Мы видим, что из требования эрмитовости оператора вытекает свойство матричных элементов

$$R_{lm} = R_{ml}^*, \tag{44,11}$$

именуемое эрмитовостью матрицы.

Итак, каждой физической величине в квантовой механике наряду с эрмитовым оператором $\hat{R}$ можно сопоставить эрмитову матрицу $R$, матричные элементы которой определяются формулой (44, 6).

Как мы увидим ниже, матричная форма квантовой механики в некоторых случаях удобнее операторной. Представление квантовой механики в матричной форме позволит нам сформулировать уравнения квантовой механики по образу уравнений классической физики. В них не будет более фигурировать волновая функция. Сами уравнения по форме будут совпадать с уравнениями классической механики, но с тем лишь принципиальным отличием, что в этих уравнениях классические величины будут заменены соответствующими матрицами. Однако прежде чем перейти к систематическому изложению квантовой механики в матричной форме, необходимо привести основные понятия матричного исчисления.

## § 45. Основы матричного исчисления

В предыдущем параграфе мы определили произвольную матрицу $R$, как совокупность величин $R_{lm}$, расположенных в определенном порядке в виде таблицы

$$R = \begin{vmatrix} R_{11} & R_{12} & \dots & \\ R_{21} & R_{22} & \dots & \\ \cdot & \cdot & \cdot & \\ \cdot & \cdot & \cdot & \\ \cdot & \cdot & \cdot & \\ R_{n1} & R_{n2} & \dots & R_{nn} \dots \\ \cdot & \cdot & \cdot & \\ \cdot & \cdot & \cdot & \\ \cdot & \cdot & \cdot & \end{vmatrix}. \tag{45,1}$$

Матрицы, у которых число столбцов равно числу строк, называются квадратными. Матрица может быть как конечной,

если конечно число столбцов и число строк, так и бесконечной, если оно как угодно велико. Матричные элементы $R_{11}$, $R_{22}$, ... ..., $R_{nn}$, ..., образующие диагональ матрицы, называются диагональными. Нулевой матрицей $O$ называют матрицу, все элементы которой равны нулю. Единичной матрицей называют диагональную матрицу, у которой все диагональные элементы равны единице. Будем обозначать эту матрицу через 1:

$$1 = \begin{Vmatrix} 1 & 0 & 0 \dots \\ 0 & 1 & 0 \dots \\ 0 & 0 & 1 \dots \\ \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots \end{Vmatrix}, \tag{45,2}$$

т. е. $(1)_{mn} = \delta_{mn}$. Матрицу можно рассматривать как некоторое гиперкомплексное число, подобно тому, как совокупность двух чисел $a$ и $b$ можно трактовать как одно комплексное число $a + ib$. Как и для комплексных чисел, можно построить алгебру гиперкомплексных чисел — матриц, определив действия сложения и умножения матриц.

Суммой двух матриц $F$ и $D$ называется матрица $R$, каждый из матричных элементов которой равен сумме соответствующих матричных элементов матриц $F$ и $D$

$$\left.\begin{aligned} R &= F + D, \\ \text{если} \qquad R_{ml} &= F_{ml} + D_{ml}. \end{aligned}\right\} \tag{45,3}$$

При этом складывают или вычитают подобные матрицы, т. е. матрицы, имеющие одинаковое число столбцов и строк. Две матрицы $F$ и $D$ равны между собой, если равны соответствующие матричные элементы

$$\left.\begin{aligned} F &= D, \\ \text{если} \qquad F_{ml} &= D_{ml}. \end{aligned}\right\} \tag{45,4}$$

Определим, далее, произведение числа $k$ на матрицу $D$ как такую матрицу $F$, каждый матричный элемент которой равен произведению числа $k$ на соответствующий матричный элемент матрицы $D$:

$$\left.\begin{aligned} F &= kD, \\ F_{ml} &= kD_{ml}. \end{aligned}\right\} \tag{45,5}$$

Матрица $L$ называется произведением матриц $F$ и $D$,

$$L = FD,$$

если матричный элемент $L_{mn}$ равен

$$L_{mn} = \sum_l F_{ml} D_{ln}. \tag{45,6}$$

Это означает, что каждый матричный элемент матрицы $L$ равен сумме произведений элементов $m$-й строки матрицы $F$ на элементы $n$-го столбца матрицы $D$.

Матрицу $F$ можно умножать на матрицу $D$ только в том случае, когда число столбцов матрицы $F$ равно числу строк матрицы $D$. Подчеркнем, что произведение матриц, как и произведение операторов, некоммутативно, т. е. в общем случае

$$FD \neq DF.$$

Если в качестве одного из сомножителей взять единичную матрицу (45,2), то мы придем к равенствам

$$F1 = 1F = F, \tag{45,7}$$

т. е. умножение на единичную матрицу коммутативно. Заметим, что при умножении двух матриц с отличными от нуля матричными элементами может получиться нулевая матрица. Пусть, например,

$$F = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}; \quad D = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}.$$

Тогда

$$L = FD = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} = 0.$$

С другой стороны,

$$L' = DF = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 2 & 0 \end{pmatrix} \neq 0.$$

Аналогично (45,6) можно образовать произведение трех и более матриц. Так, если $FD = L$, то произведение $RFD$ равно

$$(RFD)_{mn} = \sum_l R_{ml} L_{ln} = \sum_l \sum_p R_{ml} F_{lp} D_{pn}. \tag{45,8}$$

К точно такому же выражению придем, если возьмем произведение матрицы $(RF)$ на матрицу $D$. Таким образом, для матричного произведения справедлив сочетательный закон

$$(RF)\,D = R\,(FD). \tag{45,9}$$

Легко показать также, что справедлив и распределительный закон

$$R\,(F + D) = RF + RD. \tag{45,10}$$

Определение основных действий над матрицами, даваемое формулами (45,3)—(45,6), полностью соответствуют аналогич-

ным соотношениям для линейных операторов. Для формул (45,3)—(45,5) это утверждение очевидно. Нетрудно убедиться в этом соответствии и для формулы (45,6). Пусть оператор $\hat{L}$ равен произведению операторов $\hat{F}$ и $\hat{D}$, т. е. $\hat{L} = \hat{F}\hat{D}$. Найдем матрицу, отвечающую этому оператору, в некотором произвольном представлении. Предположим, что оператор $\hat{D}$ преобразует функцию $\psi$ в функцию $\varphi$, а оператор $\hat{F}$ соответственно $\varphi$ в $\chi$, так что

$$\left.\begin{aligned} \varphi &= \hat{D}\psi, \\ \chi &= \hat{F}\varphi. \end{aligned}\right\} \tag{45,11}$$

Перепишем эти равенства, разложив волновые функции $\psi$, $\varphi$ и $\chi$ в ряд по некоторой системе функций $\psi_m$. Пусть имеют место разложения

$$\psi = \sum_n c_n\psi_n; \quad \varphi = \sum_l b_l\psi_l; \quad \chi = \sum_k d_k\psi_k.$$

Сравнивая с (44,2) и (44,5), получаем

$$b_l = \sum_n D_{ln}c_n, \quad d_m = \sum_l F_{ml}b_l.$$

Подставляя $b_l$ во второе из полученных равенств, имеем

$$d_m = \sum_l \sum_n F_{ml}D_{ln}c_n. \tag{45,12}$$

С другой стороны, учитывая, что $\chi = \hat{L}\psi$, можем записать

$$d_m = \sum_n L_{mn}c_n. \tag{45,13}$$

Сравнивая (45,13) с (45,12), приходим к равенству (45,6).

Если некоторая матрица $F$ имеет неодинаковое число столбцов и строк, то, вычеркивая некоторое число столбцов или строк, можно прийти к квадратной таблице с равным числом строк и столбцов. Из этой таблицы вычисляется определитель $\det F$ матрицы $F$.

Наивысший возможный порядок этого определителя получается при вычеркивании минимального числа строк или столбцов. Наивысший порядок не равного нулю определителя, получающегося из матрицы, называют рангом матрицы.

В некоторых приложениях важную роль играет сумма диагональных элементов матрицы, именуемая часто шпуром (нем. Spur — след). По определению

$$\mathrm{Sp}\, F = \sum_n F_{nn}.$$

Матрица $F$ называется несингулярной, если можно построить матрицу, обратную к ней. Обратная матрица, которую мы обозначим через $F^{-1}$, удовлетворяет уравнениям

$$FF^{-1}=1; \quad F^{-1}F=1. \tag{45,14}$$

Чтобы найти элементы матрицы $F^{-1}$, нужно найти решение системы однородных линейных уравнений, которая получается из определения (45,14):

$$\sum_k (F)_{mk}(F^{-1})_{kn}=\delta_{mn}; \quad \sum_l (F^{-1})_{ml}F_{ln}=\delta_{mn} \tag{45,15}$$

при всевозможных значениях $m$ и $n$.

Система уравнений (45,15) может быть разрешена только в том случае, если детерминант $\det F$ матрицы $F$ отличен от нуля. (Предполагается, что матрица $F$ — квадратная.)

Пользуясь (45,14), легко найти матрицу, обратную произведению матриц $RFD\ldots$ (если она существует)

$$(RFD\ \ldots)^{-1}=\ \ldots\ D^{-1}F^{-1}R^{-1}. \tag{45,16}$$

Определим далее матрицу $F^+$, сопряженную (или эрмитово сопряженную) с исходной матрицей $F$

$$(F^+)_{mn}=(F_{nm})^*. \tag{45,17}$$

Комплексно сопряженный матричный элемент $(F_{nm})^*$ мы будем обозначать как $\overset{*}{F}_{nm}$.

Из определения (45,17) непосредственно следует, что

$$(F+D)^+=F^+ +D^+. \tag{45,18}$$

Легко определить также матрицу, сопряженную произведению матриц. Так, если $L = FD$, то

$$(L^+)_{mn}=\overset{*}{L}_{nm}=\sum_k \overset{*}{F}_{nk}\overset{*}{D}_{km}=\sum_k (D^+)_{mk}(F^+)_{kn} \tag{45,19}$$

и, следовательно,

$$(FD)^+=D^+F^+. \tag{45,20}$$

В частности, если $L = kD$, где $k$ — число, то

$$L^+=k^*D^+. \tag{45,21}$$

Соотношение (45,20), конечно, сразу обобщается на произведение любого числа матриц

$$(FDR\ \ldots)^+=\ \ldots\ R^+D^+F^+. \tag{45,22}$$

Если матрица $F$ совпадает со своей сопряженной матрицей $F^+$, $F = F^+$, то она является эрмитовой или самосопряженной. Это определение совершенно аналогично определению эрмитовости оператора (см. (44,11)). Для матричных элементов эрмитовой матрицы имеем:

$$F_{nm} = (F^+)_{nm} = F^*_{mn}. \qquad (45,23)$$

Матрица $F$ называется унитарной, если $F^+ = F^{-1}$. Последнее условие можно также переписать как

$$F^+F = FF^+ = 1. \qquad (45,24)$$

Если матрицы $F$ и $D$ унитарны, то унитарно и их произведение. Действительно,

$$(FD)^+ = D^+F^+ = D^{-1}F^{-1} = (FD)^{-1}. \qquad (45,25)$$

Мы будем встречаться также с простейшими функциями матриц, причем задание функции от матрицы означает задание закона, по которому одной матрице сопоставляется другая матрица. Так как правила умножения и сложения матриц определены, то не представляет труда ввести понятие целой рациональной функции $f(D)$ матрицы $D$. Кроме того, мы будем иметь дело и с более сложными функциями, например вида $e^D$, где $D$ — некоторая матрица. Под функцией $e^D$ понимается следующий ряд:

$$e^D = 1 + D + \frac{1}{2} D^2 + \ldots + \frac{1}{n!} D^n + \ldots \qquad (45,26)$$

Покажем, например, что матрица $R$, определяемая функцией $e^{iF}$, $R = e^{iF}$, где $F$ — произвольная эрмитова матрица, унитарна. Непосредственным вычислением легко проверить, что матрицей $R^{-1}$, обратной $R$, служит матрица $e^{-iF}$. С другой стороны, для матрицы, сопряженной к $R$, имеем

$$R^+ = \left(1 + iF - \frac{1}{2} F^2 - \frac{i}{3!} F^3 + \ldots\right)^+ =$$
$$= \left(1 - iF - \frac{1}{2} F^2 + \frac{i}{3!} F^3 + \ldots\right) = e^{-iF}$$

(так как $F^+ = F$). Таким образом, $R^+ = R^{-1}$ и, следовательно, матрица $R$ унитарна.

Сформулированные в этом параграфе правила действия останутся справедливыми и для матриц с бесконечно большим числом столбцов и строк, если только все возникающие ряды, например (45,6), будут сходящимися.

Как мы уже упоминали ранее, введение матриц тесно связано с понятием о линейном преобразовании $n$-мерного вектора.

Понятие $n$-мерного вектора является естественным обобщением обычного понятия о векторе. Вектор $\boldsymbol{x}$ в $n$-мерном пространстве задается совокупностью $n$, вообще говоря, комплексных чисел, именуемых компонентами этого вектора $x_1, x_2, \ldots, x_n$. Вряд ли стоит оговаривать, что пространство $n$-измерений не связывается с какой-либо физической реальностью, и вектор в $n$-мерном пространстве имеет характер математического обобщения. Как и для обычных векторов, можно ввести понятие о скалярном произведении двух векторов $\boldsymbol{x}$ и $\boldsymbol{y}$ в пространстве $n$ измерений. Именно, скалярное произведение вектора $\boldsymbol{y}$ на вектор $\boldsymbol{x}$ определяется как

$$(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) = \sum_{i=1}^{n} x_i^* y_i. \tag{45,27}$$

Если вектор $\boldsymbol{x}$ имеет вещественные компоненты, то определение (45,27) совпадает с обычным определением скалярного произведения.

Наоборот, если компоненты хотя бы одного из векторов $\boldsymbol{x}$ или $\boldsymbol{y}$ комплексны, то определение (45,27) приводит к новым важным следствиям.

Образуем скалярное произведение вектора $\boldsymbol{x}$ на этот же вектор $\boldsymbol{x}$

$$(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}) = \sum_{i=1}^{n} x_i^* x_i = \sum_{i=1}^{n} |x_i|^2. \tag{45,28}$$

Оно представляет обобщение понятия о квадрате вектора на случай комплексных значений компонент. Длиной или нормой вектора называют величину

$$\sqrt{\sum_{i=1}^{n} |x_i|^2}. \tag{45,29}$$

Скалярное произведение двух векторов в $n$-мерном пространстве, очевидно, некоммутативно

$$(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) = \sum_{i=1}^{n} x_i^* y_i \neq (\boldsymbol{y}, \boldsymbol{x}) = \sum_{i=1}^{n} y_i^* x_i.$$

Если скалярное произведение двух векторов равно нулю $(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) = 0$, то такие векторы называются взаимно ортогональными.

Рассмотрим две системы координат $k$ и $k'$ с взаимно ортогональными осями. Пусть компоненты некоторого вектора в системе $k$ суть $x_i$, а в системе $k'$ — $x_i'$. Как и в трехмерной евклидовой геометрии, имеет место линейная связь между

компонентами, выражаемая соотношением

$$x'_i = \sum_k a_{ik} x_k. \tag{45,30}$$

Совокупность чисел $a_{ik}$ образует матрицу

$$\| a \| = \begin{Vmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \dots & a_{nn} \end{Vmatrix},$$

называемую матрицей линейного преобразования.

При линейном ортогональном преобразовании (45,30) имеет место условие

$$(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}) = \sum_{i=1}^{n} | x_i |^2 = (\boldsymbol{x}', \boldsymbol{x}') = \sum_{i=1}^{n} | x'_i |^2. \tag{45,31}$$

Преобразование (45,30), удовлетворяющее требованию (45,31), т. е. оставляющее неизменным квадрат длины вектора, называется также унитарным преобразованием.

Понятие вектора с комплексными значениями компонент в $n$-мерном пространстве может быть обобщено на случай пространства бесконечного числа измерений, $n \to \infty$. Пространство с бесконечным числом измерений, для которого справедливо определение (45,28) квадрата длины отрезка, называется пространством Гильберта. Вектор в пространстве Гильберта имеет бесконечное число компонент, каждая из которых может быть как вещественной, так и комплексной.

Часто векторы в $n$-мерном пространстве (конечно- и бесконечномерном) представляют в виде матрицы

$$\boldsymbol{x} = \begin{Vmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ \vdots \end{Vmatrix}.$$

Тогда преобразование (45,30) можно записать в виде

$$\boldsymbol{x}' = a\boldsymbol{x}.$$

Действительно, в компонентах имеем

$$x'_i = a_{ik} x_k,$$

что совпадает с (45,30).

## § 46. Геометрическая интерпретация волновой функции и канонические преобразования

Изложенный вкратце математический аппарат, в частности векторное исчисление в пространстве Гильберта, несмотря на свою необычность и абстрактность, оказывается в точности соответствующим квантово-механическому подходу к описанию свойств микросистем. Будем рассматривать волновую функцию $\psi$, характеризующую состояние системы, как вектор $\psi$ в пространстве Гильберта бесконечного числа измерений. Каждой квантово-механической величине $F$, характеризующей свойства системы, отвечает определенная система координатных осей или, что тоже самое, система единичных базисных векторов (ортов) $\psi_1(x)$, $\psi_2(x)$, ..., $\psi_n(x)$ ... Эта система базисных векторов (базисных функций) есть не что иное, как система собственных функций оператора $\hat{F}$, отвечающих возможным собственным значениям $F_1$, $F_2$, ... (Предполагаем, что спектр дискретный, обобщение на непрерывный спектр дается далее.) Компонентами вектора $\psi$ в выбранной системе координат будут амплитуды $c_1$, $c_2$, ... $c_n$, определяемые соотношением

$$\psi(x) = \sum_k c_k\psi_k. \tag{46,1}$$

Амплитуды $c_k$, как мы знаем (см. § 19), равны

$$c_k = \int \psi_k^*(x)\,\psi(x)\,dV.$$

С другой стороны, это равенство можно рассматривать как скалярное произведение вектора $\psi$ на вектор $\psi_k$

$$c_k = (\psi_k,\ \psi) = \int \psi_k^*(x)\,\psi(x)\,dV. \tag{46,2}$$

Определение (46,2) соответствует (45,27). Так, если мы имеем два вектора $\varphi(x)$ и $\psi(x)$ с компонентами, соответственно $b_k$ и $c_k$, то скалярное произведение вектора $\psi$ на вектор $\varphi$ равно

$$(\varphi,\ \psi) = \sum_k b_k^* c_k = \int \varphi^*(x)\,\psi(x)\,dV. \tag{46,3}$$

Совокупность амплитуд $c_k$, как мы знаем, представляет волновую функцию в $F$-представлении. Таким образом, совокупность компонент вектора $\psi$ в системе координат, ортами которой служат собственные функции $\psi_n$ оператора $\hat{F}$, и является волновой функцией в $F$-представлении.

Система базисных векторов $\psi_1, \psi_2, \ldots$ является системой единичных, взаимно ортогональных векторов. Это следует из условия нормировки и ортогональности собственных функций

оператора $\hat{F}$ (см. § 18)

$$\int \psi_k^*(x)\,\psi_m(x)\,dV = (\psi_k,\ \psi_m) = \delta_{km}. \qquad (46,4)$$

Рассмотрим теперь переход от одного представления к другому представлению. Например, переход от представления, в котором диагональна матрица $F$ ($F$-представление) к представлению, в котором диагональна матрица $D$ ($D$-представление). Геометрически это означает переход от системы координат, образованной базисными векторами $\psi_m$, к системе координат, образованной базисными векторами $\varphi_k$. Функции $\psi_m$ и $\varphi_k$ являются собственными функциями соответственно операторов $\hat{F}$ и $\hat{D}$. Формулы преобразования мы получим, если разложим функции $\varphi_k$ по системе базисных функций $\psi_m$ (предполагая, что имеется дискретный спектр)

$$\varphi_k = \sum_l S_{lk}\psi_l. \qquad (46,5)$$

Очевидно,

$$S_{lk} = \int \psi_l^*(x)\,\varphi_k(x)\,dV = (\psi_l,\ \varphi_k). \qquad (46,6)$$

Матрицу $S$ назовем матрицей преобразования от одного представления к другому (или, соответственно, от одной координатной системы к другой). Определенные заключения о свойствах матрицы $S$ мы можем получить сразу, если учтем, что как система функций $\varphi_k$, так и система функций $\psi_m$ является системой нормированных ортогональных функций. Следовательно,

$$\int \varphi_m^*\varphi_k\,dV = \sum_{i,\,l} S_{im}^* S_{lk}\delta_{il} = \sum_i S_{im}^* S_{ik} = \sum_i (S^+)_{mi}\,S_{ik} = \delta_{mk}, \qquad (46,7)$$

или, в матричной форме,

$$S^+S = 1. \qquad (46,8)$$

Производя обратное разложение функций $\psi_m$ по функциям $\varphi_k$, легко получить

$$SS^+ = 1. \qquad (46,9)$$

Из уравнений (46,8), (46,9) следует, что матрица $S$ является унитарной, $S^+ = S^{-1}$. Преобразование от одного представления к другому, осуществляемое унитарной матрицей $S$, называется унитарным или каноническим преобразованием. Геометрически оно соответствует некоторому «повороту» в гильбертовом пространстве.

Не представляет труда получить и непосредственную связь между составляющими произвольного вектора $\psi$ в разных

системах координат. Пусть

$$\psi = \sum_l c_l \psi_l = \sum_k c'_k \varphi_k.$$

Воспользовавшись (46,5), имеем

$$\sum_l c_l \psi_l = \sum_{l,k} c'_k S_{lk} \psi_l.$$

Приравнивая выражения при одинаковых $\psi_l$, получаем

$$c_l = \sum_k S_{lk} c'_k. \tag{46,10}$$

Это выражение можно переписать в виде матричного равенства, если рассматривать совокупность амплитуд $c_l$ и $c'_k$ как матрицы $c$ и $c'$ с одним столбцом. Тогда

$$c = Sc'. \tag{46,11}$$

Умножая слева на $S^+$, получим:

$$c' = S^+ c. \tag{46,12}$$

Найдем, далее, как преобразуется произвольная матрица $R$ при переходе к другому представлению. Предположим, что в $F$-представлении имеет место соотношение

$$b_l = \sum_m R_{lm} c_m \tag{46,13}$$

или, в матричной форме,

$$b = Rc. \tag{46,14}$$

При переходе к другому представлению амплитуды $c$ и $b$ преобразуются в амплитуды $c'$ и $b'$ согласно (46,11), (46,12). Мы воспользуемся соотношением (46,11) и выразим в уравнении (46,14) $c$ и $b$ через $c'$ и $b'$. При этом получим

$$Sb' = RSc'.$$

Умножая это уравнение слева на $S^+$, находим

$$b' = S^+ RSc' = R'c'.$$

Таким образом, матрица $R'$, т. е. матрица $R$ в новом представлении, имеет вид

$$R' = S^+ RS$$

или

$$(R')_{mn} = \sum_{k,l} (S^+)_{mk} R_{kl} S_{ln}. \tag{46,15}$$

Рассмотрим некоторые свойства унитарного преобразования. Покажем, прежде всего, что если какая-то матрица $D$ эрмитова в одном представлении, то она будет эрмитова и в другом

представлении. Действительно, согласно (46,15) и (45,22)

$$D' = S^+DS, \quad (D')^+ = S^+D^+(S^+)^+ = S^+D^+S.$$

Так как $D^+ = D$, получаем, что $D' = D'^+$. Унитарное преобразование сохраняет также вид матричных уравнений. Пусть например, имеем уравнения

$$F + D = R; \quad PL = T.$$

Умножая уравнения слева на $S^+$, а справа на $S$, соответственно получим, пользуясь (45,9), (46,9)

$$S^+FS + S^+DS = S^+RS, \qquad S^+PSS^+LS = S^+TS.$$

Воспользовавшись (46,15), перепишем эти уравнения в новом представлении

$$F' + D' = R', \qquad P'L' = T'.$$

Как видим, вид уравнений не изменился. Покажем, что при унитарном преобразовании не изменяется также и шпур матрицы

$$\mathrm{Sp}\, F' = \sum_n F'_{nn} = \sum_{n,\,l,\,k} (S^+)_{nl} F_{lk} S_{kn} =$$
$$= \sum_{l,\,k} F_{lk} \sum_n S_{kn} (S^+)_{nl} = \sum_{l,\,k} F_{lk}\delta_{kl} = \mathrm{Sp}\, F. \quad (46,16)$$

При этом мы воспользовались (46,9).

Унитарное преобразование сохраняет также детерминант матрицы. Действительно, поскольку детерминант произведения матриц равен произведению детерминантов $\det FDR = \det F \det D \det R$, то имеем

$$\det F' = \det S^+ \det F \det S = \det F \det (S^+S) = \det F. \quad (46,17)$$

Детерминант конечной унитарной матрицы по модулю равен единице. Покажем это:

$$|\det S|^2 = (\det S)(\det S)^*,$$

но $(\det S)^* = \det S^+$, так как при транспонировании матрицы детерминант не меняется. Следовательно, получаем:

$$|\det S|^2 = \det S \det S^+ = \det (SS^+) = 1. \quad (46,18)$$

## § 47. Собственные функции и собственные значения оператора, заданного в матричной форме

Предположим, что оператор $\hat{D}$ в $F$-представлении задан в виде матрицы $D$. Посмотрим, как можно найти собственные функции и собственные значения этого оператора. Уравнение

для собственных функций и собственных значений в $F$-представлении имеет вид

$$\sum_k D_{mk} c_k^{(n)} = D_n c_m^{(n)}. \tag{47,1}$$

Здесь $D_n$ $n$-е собственное значение матрицы $D$; совокупность амплитуд $c_1^{(n)}$, $c_2^{(n)}$, ... — собственная функция оператора $D$ в $F$-представлении, отвечающая $n$-му собственному значению. Если собственную функцию написать в виде матрицы $c^{(n)}$ с одним столбцом, то уравнение (47,1) можно переписать в виде

$$Dc^{(n)} = D_n c^{(n)}. \tag{47,2}$$

Легко видеть, что величины собственных значений не зависят от выбора представления. Действительно, уравнение (47,1) в другом представлении запишется, согласно (46,15) и (46,11), как

$$D' c'^{(n)} = D'_n c'^{(n)}, \tag{47,3}$$

где $D' = S^+DS$, $c' = S^+C$. Подставляя эти значения в (47,3), получим

$$S^+DSS^+c^{(n)} = D'_n S^+ c^{(n)}.$$

Умножая слева на $S$, мы опять придем к уравнению (47,2), откуда и видно, что $D'_n = D_n$.

Задача нахождения собственных значений матрицы $D$ сводится, таким образом, к нахождению такого унитарного преобразования, которое бы привело матрицу $D$ к диагональному виду. Диагональные элементы такой матрицы, как мы знаем (см. § 44), и являются ее собственными значениями. Итак, если $S$ — искомое унитарное преобразование, то

$$S^+DS = D' \tag{47,4}$$

или, умножая слева на $S$,

$$DS = SD'.$$

Учитывая, что $(D')_{mn} = D_n \delta_{mn}$, получаем

$$\sum_k D_{mk} S_{kn} = D_n S_{mn} \tag{47,5}$$

или

$$\sum_k (D_{mk} - D_n \delta_{km}) S_{kn} = 0. \tag{47,6}$$

В этих уравнениях неизвестны как матричные элементы $S_{kn}$, так и собственные значения $D_n$. Если $D$ — квадратная матрица, имеющая $N$ столбцов и столько же строк, то мы имеем для каждого $D_n$ систему из $N$ уравнений (при $m = 1, 2, \ldots, N$). Поскольку система состоит из однородных линейных уравнений, она

имеет нетривиальное решение при условии, что ее детерминант обращается в нуль:

$$\begin{vmatrix} D_{11}-D_a & D_{12} & \dots & D_{1N} \\ D_{21} & D_{22}-D_n & \dots & D_{2N} \\ \vdots & & & \vdots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \vdots & & & \vdots \\ D_{N1} & D_{N2} & \dots & D_{NN}-D_n \end{vmatrix} = 0. \qquad (47,7)$$

Это уравнение $N$-й степени относительно неизвестного $D_n$. Решая его, найдем $N$ корней, которые и будут собственными значениями матрицы $D$. В частности, некоторые значения могут совпадать между собой, тогда имеет место вырождение. Все собственные значения эрмитовой матрицы $D$ будут вещественными. Действительно, матрица $D'$ также эрмитова (см. § 46), а следовательно, $(D')_{nn}=(D')^*_{nn}$ или $D_n=D^*_n$. Подставляя значение $D_1$, $D_2$ ... $D_N$ в систему (47,6), мы для каждого $D_n$ определяем совокупность матричных элементов $S_{kn}(S_{1n}, S_{2n} \dots)$, т. е. в конечном счете определяем матрицу унитарного преобразования $S$. Сравнивая (47,5) с (47,1), мы видим, что каждый столбец $\begin{Bmatrix} S_{1n} \\ S_{2n} \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ S_{Nn} \end{Bmatrix}$ матрицы $S$ является собственной функцией оператора $\hat{D}$ в $F$-представлении, отвечающей данному собственному значению $D_n$. Зная матрицу $S$, мы можем найти совокупность собственных функций оператора $\hat{D}$ и в $x$-представлении. Действительно, если в первоначальном $F$-представлении базисными функциями была совокупность $\psi_1(x)$, $\psi_2(x)$ ... собственных функций оператора $\hat{F}$, то в новом представлении, в котором диагональна матрица $D$ ($D$-представлении) базисными будут собственные функции $\varphi_1(x)$, $\varphi_2(x)$ ... оператора $\hat{D}$. Связь между ними дается формулой (46,5), которая и определяет функции $\varphi_k(x)$

$$\varphi_k(x)=\sum_l S_{lk}\psi_l(x). \qquad (47,8)$$

Если мы имеем две матрицы $F$ и $D$, то с помощью одного и того же унитарного преобразования $S$ их можно одновременно привести к диагональному виду только в том случае, если они коммутируют, т. е. если $FD = DF$. Действительно, предположим, что $F$ и $D$ приведены к диагональному виду, соответственно $F'$

и $D'$. Образуем матрицу $F'D'$:

$$(F'D')_{mn} = \sum_k F'_{mk}D'_{kn} = F'_{mm}D'_{mn}\delta_{mn} = (D'F')_{mn}. \tag{47,9}$$

Следовательно,

$$F'D' = D'F'.$$

Поскольку при унитарном преобразовании вид матричного уравнения не меняется (см. § 46), то в исходном представлении имеем $FD = DF$.

Мы доказали, таким образом, что коммутация матриц необходима для того, чтобы их можно было привести одновременно к диагональному виду. Легко показать, что это условие является также и достаточным.

В этом параграфе мы всюду предполагали, что имеем дело с конечными матрицами. Если, однако, число строк и столбцов $N$ стремится к бесконечности, то математически вопрос существенно усложняется. Система (47,6) будет теперь системой из бесконечно большого числа уравнений. Бесконечно высокой степени будет и уравнение (47,7). Можно показать, однако, что и в этом случае произвольная эрмитова матрица с помощью некоторого унитарного преобразования приводится к диагональному виду с действительными собственными значениями. Мы не будем останавливаться на доказательстве этого положения.

## § 48. Непрерывные матрицы. Обозначения Дирака

До сих пор при обсуждении свойств матриц мы считали, что переменные пробегают дискретный ряд значений. Ясно, однако, что предыдущие результаты должны быть обобщены на случай переменных, изменяющихся непрерывно.

Оказывается, что это обобщение можно провести непосредственно. Все полученные выше формулы остаются справедливыми, если в них все суммы заменены на соответствующие интегралы. Например, формула (45,6) для матричного элемента от произведения двух матриц теперь будет иметь вид

$$L = FD,$$

$$L_{\alpha\beta} = \int F_{\alpha\gamma}D_{\gamma\beta}\,d\gamma. \tag{48,1}$$

Интегрирование проводится по всей области изменения соответствующей переменной. Единичная матрица $I$ определяется теперь равенством

$$(1)_{\alpha\beta} = \delta(\alpha - \beta), \tag{48,2}$$

т. е. заменяется $\delta$-функцией. При этом, как легко видеть, для произвольной матрицы $F$ справедливо соотношение

$$F1 = 1F = F.$$

Формулы § 3, выражающие преобразование волновой функции от координатного представления к импульсному и наоборот, также могут быть написаны в матричной форме.

Прежде всего заметим, что координата $q$ в своем собственном представлении должна выражаться диагональной матрицей (см. § 44). Ограничиваясь, для простоты, одномерным случаем, имеем в соответствии с (48,2):

$$q_{xx'} = x\delta(x - x'). \tag{48,3}$$

Найдем в этом представлении матрицу, изображающую импульс частицы. Так же, как и в § 26, будем исходить из соотношения

$$pq - qp = \frac{\hbar}{i}. \tag{48,4}$$

Покажем, что это соотношение удовлетворяется, если выбрать матрицу $p$ в виде

$$p_{xx'} = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\delta(x - x'). \tag{48,5}$$

Прежде всего, приравнивая матричные элементы левой и правой части соотношения (48,4), имеем

$$\int \left(p_{xx''}q_{x''x'} - q_{xx''}p_{x''x'}\right) dx'' = \frac{\hbar}{i}\delta(x - x').$$

Подставляя сюда (48,3) и (48,5), получим

$$\int \Big[x''\delta(x'' - x')\frac{\partial}{\partial x}\delta(x - x'') - x\delta(x - x'')\frac{\partial}{\partial x''}\delta(x'' - x')\Big] dx'' = \delta(x - x').$$

Берем интегралы в соответствии с правилами действия над $\delta$-функциями (см. приложение III т. I). Находим, что, поскольку $y\delta'(y) = -\delta(y)$ (см. (III. 8)),

$$-(x - x')\frac{\partial}{\partial x}\delta(x - x') = \delta(x - x').$$

Следовательно, мы доказали, что матрицы (48,3) и (48,5) удовлетворяют соотношению (48,4). Если матрицей $p_{xx'}$ подействовать по правилам (44,5) на некоторую функцию $\psi(x)$, то мы получим функцию $\varphi(x)$, равную

$$\varphi(x) = \int p_{xx'}\psi(x')\,dx' = \frac{\hbar}{i}\int \frac{\partial}{\partial x}\delta(x - x')\,\psi(x')\,dx' = -\frac{\hbar}{i}\int \psi(x')\frac{\partial}{\partial x'}\delta(x - x')\,dx'.$$

Интегрируя по частям, получаем

$$\varphi(x) = \frac{\hbar}{i}\int \delta(x - x')\frac{\partial\psi}{\partial x'}\,dx' = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial\psi}{\partial x}.$$

Мы видим, что действие матрицы $p_{xx'}$ эквивалентно действию оператора $\hat{p} = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}$. Формула преобразования волновой функции от координатного представления к импульсному имеет вид

$$c(p) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}}\int \psi(x)\,e^{-\frac{i}{\hbar}px}\,dx. \tag{48,6}$$

В матричной форме это соотношение, согласно (46,12), можно переписать так:

$$c(p) = \int S^{+}_{px}\psi(x)\,dx, \tag{48,7}$$

где $S^{+}_{px} = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}}e^{-\frac{i}{\hbar}px}$ является унитарной матрицей преобразования от $x$-представления к $p$-представлению. Естественно, что обратное преобразование выполняется матрицей $S_{xp}$

$$\psi(x) = \int S_{xp}c(p)\,dp, \tag{48,8}$$

где

$$S_{xp} = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}}e^{\frac{i}{\hbar}px}.$$

С помощью матрицы $S_{xp}$ не представляет труда определить вид матрицы координаты $q$ в $p$-представлении. Согласно (46,15), имеем

$$q_p = S^{+}q_xS$$

или

$$(q_p)_{p'q''} = \int S^{+}_{p'\tau}(q_x)_{\tau\tau'}S_{\tau'p''}\,d\tau\,d\tau'.$$

Подставляя в интеграл значение матриц $S$ и $q_x$ (48,3), получаем

$$(q_p)_{p'p''} = \frac{1}{2\pi\hbar}\int e^{-\frac{i}{\hbar}p'\tau}\tau\delta(\tau - \tau')\,e^{\frac{i}{\hbar}\tau'p''}\,d\tau\,d\tau' = \frac{1}{2\pi\hbar}\int e^{-\frac{i}{\hbar}p'\tau}\tau e^{\frac{i}{\hbar}p''\tau}\,d\tau =$$

$$= \frac{1}{2\pi i}\frac{\partial}{\partial p''}\int_{-\infty}^{\infty} e^{\frac{i}{\hbar}(p''-p')\tau}\,d\tau = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial p''}\delta(p'' - p').$$

Итак, мы получили матрицу координаты в $p$-представлении

$$(q_p)_{p'p''} = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial p''}\delta(p'' - p'). \tag{48,9}$$

Этот результат, конечно, можно было бы получить и непосредственно из соотношения (48,4), поскольку матрица $p$ в своем собственном представлении диагональна.

Зная выражение для матриц $q$ и $p$, мы можем найти матрицу произвольной функции от $q$ и $p$. Так, если $H(p, q)$ — некоторая функция от $p$ и $q$, то матрица $H$ будет получена, если вместо $p$ и $q$ подставить соответствующие матрицы и произвести необходимые операции по правилам матричного сложения и умножения. При этом матрица $H$, как и соответствующий оператор, понимается в смысле разложения в степенной ряд по $q$ и $p$.

Итак, предположим, что $H(p, q)$ — некоторая известная функция — гамильтониан системы. В координатном представлении матрицы $q$ и $p$ даются выражениями (48,3) и (48,5). Следовательно, в этом представлении известна и матрица $H$. С помощью некоторого унитарного преобразования $S$ эта матрица может быть преобразована к диагональному виду $H' = E_n\delta_{nm}$. Будем предполагать, для определенности, что матрица $H'$ обладает дискретным спектром. В противном случае нужно писать не $\delta_{nm}$, а $\delta(n - m)$

$$H' = S^+ H(p, q) S.$$

Определим матрицу $S$. Поскольку $HS = SH'$, имеем

$$\int H_{xx'} S_{x'n}\, dx' = \sum_m S_{xm} H'_{mn} = E_n S_{xn}. \tag{48,10}$$

Рассмотрим интегралы, стоящие слева, для различных функций $H(p, q)$. Прежде всего

$$\int q_{xx'} S_{x'n}\, dx' = x S_{xn}, \qquad \int p_{xx'} S_{x'n}\, dx' = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} S_{xn}.$$

Далее, если $U(q)$ — некоторая функция $q$, то ее матрица, как легко видеть, имеет вид $U_{xx'} = U(x)\delta(x - x')$, и интеграл равен

$$\int U_{xx'} S_{x'n}\, dx' = U(x) S_{xn}.$$

Аналогичные результаты получим и для функций от $p$. Например, матрица величины $p^2$ равна по правилам матричного перемножения $(p^2)_{xx'} = \left(\frac{\hbar}{i}\right)^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} \delta(x - x')$. Соответственно интеграл

$$\int (p^2)_{xx'} S_{x'n}\, dx' = \left(\frac{\hbar}{i}\right)^2 \int \frac{\partial^2}{\partial x^2} \delta(x - x') S_{x'n}\, dx' = \left(\frac{\hbar}{i}\right)^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} S_{xn}.$$

Для произвольной функции $H(p, q)$, следовательно, получим

$$\int H_{xx'} S_{x'n}\, dx' = H\left(x, \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}\right) S_{xn} = \hat{H} S_{xn}. \tag{48,11}$$

Соотношение (48,10) является, очевидно, не чем иным, как уравнением Шредингера, записанным в матричной форме в $x$-представлении

$$\int H_{xx'}\psi_n(x')\,dx' = E_n\psi_n(x).$$

Не представляет труда переписать это уравнение и в $p$-представлении как в операторной, так и в матричной форме. Полагая

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + U(x)$$

и обозначая функцию $\psi_n(x)$ в $p$-представлении через $c_n(p)$ (см. (48,6)), получим

$$\left(\frac{p^2}{2m} + \hat{U}(p)\right)c_n(p) = E_n c_n(p), \qquad (48,12)$$

где $\hat{U}(p)$ — оператор потенциальной энергии в $p$-представлении.

В матричной форме уравнение (48,12) имеет вид

$$\frac{p^2}{2m}c_n(p) + \int U_{pp'}c_n(p')\,dp' = E_n c_n(p). \qquad (48,12')$$

Здесь $U_{pp'}$ — матрица оператора $\hat{U}$, строится с помощью (48,9) или, что то же самое, определяется равенством

$$U_{pp'} = \int U(x)\,e^{-\frac{i}{\hbar}(p-p')x}\,dx.$$

Уравнение (48,10), пользуясь (48,11), перепишем в виде

$$\hat{H}S_{xn} = E_n S_{xn}.$$

Мы видим, что матрица $S$ строится из собственных функций $\psi_n(x)$ оператора $\hat{H}$

$$S_{xn} = \psi_n(x). \qquad (48,13)$$

Если мы имеем некоторый оператор $\hat{F}$, то матрица этого оператора в энергетическом представлении дается, как известно, соотношением

$$F_{nm} = \int \psi_n^*\hat{F}\psi_m\,dx.$$

С другой стороны, это же соотношение можно рассматривать как унитарное преобразование от координатного представления, в котором величина $F$ задана матрицей $F_{xx'}$, к энергетическому представлению. Матрица унитарного преобразования дается формулой (48,13). Действительно,

$$F_{nm} = \int S^+_{nx}F_{xx'}S_{x'm}\,dx\,dx'$$

и

$$\int F_{xx'}S_{x'm}\,dx' = \hat{F}S_{xm}$$

по аналогии с (48,11). Следовательно,

$$F_{nm} = \int S^{+}_{nx}\hat{F}S_{xm}\,dx = \int \psi^{*}_{n}(x)\,\hat{F}\psi_{m}(x)\,dx,$$

и мы опять пришли к прежнему соотношению. Таким образом, все соотношения, полученные в этой главе для матриц, непосредственно обобщаются и на случай операторов, заданных в дифференциальной форме. Имея в виду это обстоятельство, мы в дальнейшем всегда, употребляя слово «оператор», будем подразумевать, что оператор может быть задан как в дифференциальной, так и в матричной форме.

Кратко остановимся, наконец, на некоторых обозначениях, предложенных Дираком, поскольку они часто встречаются в литературе.

Волновую функцию $\psi$ или, вернее, совокупность ее компонент в некоторой координатной системе (в некотором представлении) Дирак называет кэт-вектором и обозначает через $|\psi\rangle$. Например, волновая функция $\psi_{nlm}$, описывающая состояние с заданными квантовыми числами $n$, $l$, $m$, обозначается через $|nlm\rangle$. С другой стороны, о функциях, комплексно сопряженных к рассмотренным, говорят как о бра-векторах и обозначают через $\langle\psi|$ ($\psi^{*}_{nlm}$ обозначается соответственно через $\langle nlm|$). Название бра и кэт происходит от английского слова «bracket» — скобка $\langle\ \rangle$. В матричных обозначениях кэт-вектору отвечает некоторый столбец, а бра-вектору — строка. Скалярное произведение бра-вектора $\psi^{*}_{b} = \langle b|$ и кэт-вектора $\psi_{a} = |a\rangle$ обозначается через $\langle b|a\rangle$, т. е.

$$\int \psi^{*}_{b}(x)\,\psi_{a}(x)\,dx = \langle b|a\rangle. \tag{48,14}$$

С другой стороны, это скалярное произведение можно, очевидно трактовать как волновую функцию $\psi_a$ в $b$-представлении. Действительно, если мы напишем разложение

$$\psi_a(x) = \int c_a(b)\,\psi_b(x)\,db \tag{48,15}$$

(для дискретного спектра интеграл заменяется суммой), то $c_a(b)$ представляет волновую функцию состояния «$a$» в $b$-представлении

$$c_a(b) = \int \psi^{*}_{b}(x)\,\psi_{a}(x)\,dx = \langle b|a\rangle. \tag{48,16}$$

Соответственно волновая функция состояния «$a$» в $x$-представлении $\psi_a(x)$ в обозначениях Дирака имеет вид

$$\psi_a(x) = \langle x \mid a \rangle. \qquad (48,17)$$

В этих обозначениях разложение (48,15) можно переписать как

$$\langle x \mid a \rangle = \int_b \langle x \mid b \rangle \langle b \mid a \rangle \, db. \qquad (48,18)$$

Из (48,16) вытекает соотношение

$$\langle b \mid a \rangle = \langle a \mid b \rangle^*, \qquad (48,19)$$

связывающее волновую функцию состояния «$a$» в $b$-представлении с волновой функцией состояния «$b$» в $a$-представлении. Волновая функция, описывающая состояние с заданным импульсом, в координатном представлении $\psi_p(\boldsymbol{r})$ в обозначениях Дирака имеет вид

$$\psi_p(\boldsymbol{r}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{pr}} = \langle \boldsymbol{r} \mid \boldsymbol{p} \rangle. \qquad (48,20)$$

Соответственно разложение произвольной функции $\psi(\boldsymbol{r})$ по плоским волнам напишем как

$$\langle \boldsymbol{r} \mid \psi \rangle = \int_p \langle \boldsymbol{r} \mid \boldsymbol{p} \rangle \langle \boldsymbol{p} \mid \psi \rangle \, d\boldsymbol{p} \qquad (48,21)$$

или

$$\langle \boldsymbol{r} \mid \rangle = \int_p \langle \boldsymbol{r} \mid \boldsymbol{p} \rangle \langle \boldsymbol{p} \mid \rangle \, d\boldsymbol{p}. \qquad (48,22)$$

Собственная функция оператора момента количества движения $\hat{L}^2$ в координатном представлении в обозначениях Дирака имеет вид

$$Y_{lm}(\vartheta, \varphi) = \langle \vartheta, \varphi \mid l, m \rangle = \left\langle \frac{\boldsymbol{r}}{r} \middle| l, m \right\rangle. \qquad (48,23)$$

Функция $\left\langle \frac{\boldsymbol{r}}{r} \middle| l, m \right\rangle$ осуществляет переход от представления $lm$ к координатному представлению. Функция

$$Y^*_{lm}(\vartheta, \varphi) = \left\langle \frac{\boldsymbol{r}}{r} \middle| l, m \right\rangle^* = \left\langle l, m \middle| \frac{\boldsymbol{r}}{r} \right\rangle$$

[см. (48,19)], наоборот, осуществляет переход от координатного представления к угловому.

В том случае, когда углы $\vartheta$, $\varphi$ определяют направление вектора импульса, функция

$$Y_{lm}(\vartheta, \varphi) = \langle \vartheta, \varphi \mid l, m \rangle = \left\langle \frac{\boldsymbol{p}}{p} \middle| l, m \right\rangle \qquad (48,24)$$

осуществляет переход от представления $lm$ к импульсному представлению. Она является собственной функцией оператора $\hat{L}^2$ в импульсном представлении. Матричный элемент $F_{ba}$ в обозначениях Дирака имеет вид

$$F_{ba}=\int \psi_b^* \hat{F} \psi_a \, dV = \langle b \mid F \mid a \rangle. \qquad (48,25)$$

Величины $a$ и $b$, характеризующие состояния системы, могут пробегать как дискретный, так и непрерывный набор значений. Если каждое из состояний $a$ и $b$ характеризуется набором квантовых чисел, например $n'$, $l'$, $m'$ и $n$, $l$, $m$, то матричный элемент, обозначаемый обычно через $F_{n'l'm';\, nlm}$ или $F_{nlm}^{n'l'm'}$, в обозначениях Дирака имеет вид

$$\langle n'l'm' \mid F \mid nlm \rangle.$$

## § 49. Представления Шредингера, Гейзенберга и представление взаимодействия

В этом параграфе мы обсудим некоторые вопросы, связанные с дальнейшим развитием и обобщением математического аппарата квантовой механики. Имеется в виду рассмотрение способов описания развития процесса во времени.

До сих пор мы всецело основывались на уравнении Шредингера

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H} \psi,$$

согласно которому волновая функция системы $\psi(x, t)$ могла быть найдена в произвольный момент времени $t$, если известно ее начальное значение $\psi(x, 0)$. При таком подходе развитию процесса во времени отвечает соответствующее изменение волновой функции системы $\psi(x, t)$.

Развитие процесса во времени можно описать с помощью оператора $\hat{V}(t)$, действующего на волновую функцию, заданную в некоторый начальный момент времени

$$\psi(x, t) = \hat{V}(t)\, \psi(x, 0). \qquad (49,1)$$

Здесь за начало отсчета времени мы взяли момент $t = 0$. С равным успехом, конечно, за начало отсчета можно было взять произвольный момент времени $t = t_0$. Подставляя выражение (49,1) в уравнение Шредингера, получаем уравнение для оператора $\hat{V}(t)$

$$i\hbar \frac{\partial \hat{V}(t)}{\partial t} = \hat{H} \hat{V}(t) \qquad (49,2)$$

при условии (см. (49,1)) $\hat{V}(0)=1$. Если оператор $\hat{H}$ не зависит от времени явно, то решение уравнения (49,2) можно формально написать в виде

$$\hat{V}(t)=e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}, \tag{49,3}$$

где экспонента понимается в смысле разложения в степенной ряд.

Оператор $\hat{V}(t)$ является, очевидно, унитарным:

$$\hat{V}^{+}(t)\hat{V}(t)=1.$$

Унитарность оператора $\hat{V}(t)$ имеет простой смысл: она отвечает сохранению во времени условия нормировки волновой функции

$$\int \psi^{*}(x,\ 0)\psi(x,\ 0)\,dV=\int \psi^{*}(x,\ t)\psi(x,\ t)\,dV=$$

$$=\int \hat{V}^{*}\psi^{*}(x,\ 0)\hat{V}\psi(x,\ 0)\,dV=\int \psi^{*}(x,\ 0)\hat{V}^{+}\hat{V}\psi(x,\ 0)\,dV.$$

Таким образом, описание эволюции системы во времени сводится к тому, что волновая функция или вектор состояния $\psi(x,\ t)$ изменяется во времени. Это изменение можно характеризовать при помощи унитарного оператора $\hat{V}(t)$, действующего на начальную волновую функцию $\psi(x,\ 0)$ и в каждый данный момент превращающего ее в функцию $\psi(x,\ t)$. При этом операторы, характеризующие систему, например, операторы $\hat{x}$, $\hat{p}$ или любые операторы $\hat{F}(\hat{x},\hat{p})$, не изменяются во времени явно.

Если характеризовать состояние системы с помощью гильбертова пространства, то ход эволюции системы можно описать следующим образом: пусть задана система ортов в пространстве Гильберта. Эта система ортов определяется системой собственных функций операторов, образующих полный набор для данной системы. В начальный момент состояние системы задается вектором состояния $\psi(x,\ 0)$. Эволюция системы во времени отвечает повороту вектора $\psi$ состояния в гильбертовом пространстве. При этом его длина $(\psi,\ \psi)$ имеет постоянное значение. Такое описание системы, при котором волновая функция изменяется во времени, а операторы от времени не зависят, носит название представления Шредингера. Заметим, что слово «представление» имеет при этом более общий смысл, чем тот, который вкладывался в него до сих пор, и характеризует именно способ описания изменения состояния во времени. В частности, можно задать состояние системы в шредингеровском координатном представлении, шредингеровском импульсном представлении, шредингеровском энергетическом представлении и т. д. До сих пор, говоря о задании волновой функции в том или ином

представлении, мы имели в виду соответствующее шредингеровское представление. Как сами операторы $\hat{x}$, $\hat{p}$ и вообще $\hat{F}$, так и операторы соответствующих производных по времени $\hat{\dot{x}}$, $\hat{\dot{p}}$ и $\hat{\dot{F}}$, в представлении Шредингера не изменяются во времени (мы предполагаем, что нет нестационарных внешних полей). Действительно, оператор $\hat{\dot{F}}$, например, согласно (31,2) имеет вид

$$\hat{\dot{F}} = [\hat{H}, \hat{F}]$$

и не изменяется во времени, так как не изменяются операторы $\hat{F}$ и $\hat{H}$. Не представляет труда определить и матричные элементы оператора $\hat{\dot{F}}$:

$$(\dot{F})_{mn} = [\hat{H}, \hat{F}]_{mn}. \tag{49,4}$$

В энергетическом представлении (шредингеровском энергетическом), т. е. в таком представлении, в котором диагональна матрица $\hat{H}$, соотношение (49,4) имеет вид

$$(\dot{F})_{mn} = \frac{i}{\hbar}(H_{mm}F_{mn} - F_{mn}H_{nn}) = i\omega_{mn}F_{mn}, \tag{49,5}$$

где

$$\omega_{mn} = \frac{1}{\hbar}(E_m - E_n), \qquad F_{mn} = \int \psi_m^*(x)\hat{F}\psi_n(x)\,dV.$$

Матрица $(\dot{F})_{mn}$, как и матрица $(F_{mn})$, не зависит явно от времени. Наряду с представлением Шредингера в квантовой механике часто используется другое представление, именуемое представлением Гейзенберга.

В представлении Гейзенберга эволюция системы во времени описывается при помощи операторов, зависящих от времени. При этом сама волновая функция $\Phi(x)$ считается зависящей только от координат, но не зависящей от времени. Наглядно картину эволюции в представлении Гейзенберга можно представить себе как поворот системы базисных векторов в гильбертовом пространстве относительно неподвижного вектора состояния $\Phi(x)$.

Переход к представлению Гейзенберга в общем случае осуществляется с помощью унитарного преобразования

$$\Phi(x) = \hat{V}^{-1}(t)\psi(x, t) = \psi(x, 0). \tag{49,6}$$

где $\Phi(x)$ — волновая функция (вектор состояния) в представлении Гейзенберга.

Пользуясь выражением (49,6) и учитывая, что

$$\hat{V}^{-1}(t) = \hat{V}^{+}(t) = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t},$$

получаем

$$\Phi(x)=\psi(x,\ 0)=e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\psi(x,\ t). \tag{49,7}$$

В соответствии с общими правилами (46,15) произвольный оператор $\hat{F}$, заданный в шредингеровском представлении, будет иметь в гейзенберговском представлении (обозначим через $\hat{F}_H$) следующий вид:

$$\hat{F}_H=\hat{V}^+(t)\hat{F}\hat{V}(t)$$

или

$$\hat{F}_H=e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\hat{F}e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}. \tag{49,8}$$

В начальный момент времени выражения как для волновых функций, так и для операторов в обоих представлениях совпадают. Заметим, что оператор $\hat{H}$ в представлении Гейзенберга будет тот же самый, что и в представлении Шредингера $\hat{H}_H=\hat{H}$. Это сразу следует из формулы (49,8), если учесть, что оператор $\hat{H}$ коммутирует со всеми членами ряда разложения функции $e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}$.

Определим матричные элементы оператора $\hat{F}_H$ с помощью собственных функций оператора $\hat{H}$ (гейзенберговское энергетическое представление).

$$(F_H)_{mn}=\sum_{k,\,l}\left(e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\right)_{mk}F_{kl}\left(e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\right)_{ln}=e^{\frac{i}{\hbar}E_mt}F_{mn}e^{-\frac{i}{\hbar}E_nt}=e^{i\omega_{mn}t}F_{mn}. \tag{49,9}$$

Если оператор $\hat{F}$ является некоторой функцией от $\hat{x}$ и $\hat{p}$, то, как следует из формулы (49,8), мы получим оператор $\hat{F}$ в гейзенберговском представлении, беря в этом представлении операторы $\hat{x}$ и $\hat{p}$

$$\hat{F}_H=F(\hat{x}_H,\ \hat{p}_H). \tag{49,10}$$

Действительно, если, например, $\hat{F}=\hat{\boldsymbol{p}}^2$, то

$$\hat{F}_H=e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\hat{\boldsymbol{p}}^2e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}=e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\hat{\boldsymbol{p}}e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\hat{\boldsymbol{p}}e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}=\hat{\boldsymbol{p}}_H^2.$$

Аналогичным образом легко проверить, что

$$\left[\hat{p}_{x_H},\ \hat{x}_H\right]=\left[\hat{p}_x,\ \hat{x}\right]=1. \tag{49,11}$$

Уравнение движения в гейзенберговском представлении получим,

дифференцируя (49,8)

$$\frac{\partial \hat{F}_H}{\partial t} = \frac{i}{\hbar}(\hat{H}\hat{F}_H - \hat{F}_H\hat{H}) = [\hat{H}, \hat{F}_H]. \qquad (49,12)$$

Если взять матричный элемент от левой и правой части равенства по функциям $\psi_n(x)$, то получим, аналогично (49,5),

$$\left(\frac{\partial F_H}{\partial t}\right)_{mn} = i\omega_{mn}(F_H)_{mn}. \qquad (49,13)$$

Конечно, к точно такому же выражению мы придем, если будем исходить из выражения (49,9), а производную от матрицы $F_H$ по времени $t$ определим как такую матрицу, каждый матричный элемент которой равен производной по времени от соответствующего матричного элемента матрицы $F_H$, т. е

$$\left(\frac{\partial F_H}{\partial t}\right)_{mn} = \frac{\partial (F_H)_{mn}}{\partial t} = i\omega_{mn}(F_H)_{mn}. \qquad (49,14)$$

Таким образом, если оператор $\hat{F}_H$ изображает некоторую физическую величину, то оператор $\frac{\partial \hat{F}_H}{\partial t}$ — соответственно ее производную по времени.

Отметим, что уравнения (31,7), (31,8) также могут быть выражены в гейзенберговском представлении. Пользуясь (49,11), (49,12), имеем

$$\frac{\partial \hat{x}_H}{\partial t} = \frac{1}{m}\hat{p}_H; \quad \frac{\partial \hat{p}_H}{\partial t} = -\frac{\partial \hat{U}_H}{\partial x} \qquad (49,15)$$

или, в гейзенберговском энергетическом представлении

$$\left(\frac{\partial x_H}{\partial t}\right)_{mn} = \frac{\partial}{\partial t}(x_H)_{mn} = i\omega_{mn}(x_H)_{mn} = \frac{1}{m}(p_H)_{mn}, \qquad (49,16)$$

$$\left(\frac{\partial p_H}{\partial t}\right)_{mn} = \frac{\partial}{\partial t}(p_H)_{mn} = i\omega_{mn}(p_H)_{mn} = \left(-\frac{\partial U}{\partial x}\right)_{mn}. \qquad (49,17)$$

Матричные соотношения (49,16) и (49,17) по внешнему виду соответствуют классическим законам Ньютона.

Первоначально квантовая механика была сформулирована Гейзенбергом именно как матричная механика. Каждой механической переменной Гейзенберг сопоставлял некоторую матрицу с элементами, гармонически зависящими от времени. Соотношения между матрицами брались в форме классических соотношений, например (49,17).

Представления Шредингера и Гейзенберга не исчерпывают все использующиеся на практике методы описания квантовых систем.

Очень часто в квантовой механике приходится иметь дело с системами, гамильтониан которых может быть разбит на две части: одна из них, $\hat{H}^{(0)}$, представляет собой собственно гамильтониан системы, а другая, $\hat{H}'$, описывает взаимодействие данной системы с внешними полями или другими системами.

В этом случае часто оказывается удобным пользоваться так называемым представлением взаимодействия, введенным Дираком.

Представление взаимодействия является в некотором смысле промежуточным между представлениями Шредингера и Гейзенберга. Именно, определим волновую функцию в представлении взаимодействия соотношением

$$\varphi(x, t) = \exp\left(\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t\right)\psi(x, t). \tag{49,18}$$

Аналогично, произвольный оператор $\hat{F}$ в представлении взаимодействия определим как

$$\hat{F}_{\text{в}} = \exp\left(\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t\right)\hat{F}\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t\right). \tag{49,19}$$

В отличие от (49,7) и (49,8), в формулах преобразования (49,18) и (49,19) входит не полный гамильтониан, но лишь гамильтониан системы без взаимодействия $\hat{H}_0$.

Не представляет труда получить уравнение, которому удовлетворяет функция $\varphi(x, t)$. Для этого продифференцируем соотношение (49,18) по времени и воспользуемся уравнением Шредингера

$$i\hbar\frac{\partial\varphi(x, t)}{\partial t} = -\hat{H}_0\varphi(x, t) + e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t}(\hat{H}_0 + \hat{H}')\psi(x, t) =$$

$$= e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t}\hat{H}'\psi(x, t) = e^{\frac{1}{\hbar}\hat{H}_0 t}\hat{H}'e^{-\frac{1}{\hbar}\hat{H}_0 t}\varphi(x, t) \tag{49,20}$$

или, учитывая (49,19), получим

$$i\hbar\frac{\partial\varphi(x, t)}{\partial t} = \hat{H}'_{\text{в}}\varphi(x, t), \tag{49,21}$$

т. е. мы получили уравнение Шредингера с гамильтонианом $H'_{\text{в}}$.

Из соотношения (49,21) находим закон изменения во времени оператора, заданного в представлении взаимодействия

$$\frac{\partial\hat{F}_{\text{в}}}{\partial t} = \frac{i}{\hbar}(\hat{H}_0\hat{F}_{\text{в}} - \hat{F}_{\text{в}}\hat{H}_0) = [\hat{H}_0, \hat{F}_{\text{в}}]. \tag{49,22}$$

Заметим, что оператор $\hat{H}_0$ имеет один и тот же вид как в представлении Шредингера, так и в представлении взаимодействия.

Если оператор $\hat{F}$ зависит от $\hat{x}$ и $\hat{p}$, то аналогично (49,10) легко показать, что

$$\hat{F}_{\text{в}} = F(\hat{x}_{\text{в}}, \hat{p}_{\text{в}}). \tag{49,23}$$

Итак, мы видим, что в представлении взаимодействия зависимость от времени волновой функции определяется оператором взаимодействия $\hat{H}'_{\text{в}}$, в то время как зависимость от времени, связанная с оператором $\hat{H}_0$ перенесена непосредственно на операторы.

## § 50. Линейный осциллятор (матричное представление)

В § 10 мы рассмотрели линейный гармонический осциллятор при помощи волнового уравнения Шредингера. Однако первоначально эта задача была исследована матричным методом[1]). Мы приведем здесь это решение. С одной стороны, оно служит хорошей иллюстрацией использования матричных методов, а с другой стороны, ряд полученных выражений понадобится нам в дальнейшем.

Будем исходить из известного выражения для гамильтониана системы

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2\hat{x}^2}{2}. \tag{50,1}$$

Здесь $\omega$ — «классическая частота осциллятора». Под операторами $\hat{p}$ и $\hat{x}$ в (50,1) понимаются некоторые матрицы, связь между которыми дается уравнениями (49,15). Задачу решаем в гейзенберговском энергетическом представлении. Тогда в соответствии с (49,9) имеем:

$$(x_H)_{nm} = x_{nm} e^{i\omega_{nm} t}. \tag{50.2}$$

Здесь индексами $m$, $n$ мы обозначаем уровни энергии исследуемой системы. Как следует из (49,15) и (50,1), оператор $\hat{x}_H$ удовлетворяет следующему уравнению движения:

$$\frac{\partial^2 \hat{x}_H}{\partial t^2} + \omega^2 \hat{x}_H = 0. \tag{50,3}$$

Мы видим, что в гейзенберговском представлении уравнения движения имеют вид обычных уравнений движения классической механики. В последних, однако, классическая координата $x$ заменена квантовомеханическим оператором $\hat{x}_H$. Соответственно для матричных элементов $x_{nm}$ с учетом (50,2) получаем

$$\left(\omega^2 - \omega_{nm}^2\right) x_{nm} = 0. \tag{50,4}$$

---

[1]) M. Born, W. Heisenberg, P. Iordan, Zeits. f. Physik **35**, 557 (1925).

Из (50,4) следует, что отличны от нуля лишь такие матричные элементы $x_{nm}$, для которых выполняется условие $\omega_{nm} = \pm\omega$ или $\frac{E_n - E_m}{\hbar} = \pm\omega$. Пронумеруем состояния таким образом, что $\omega_{n,\, n-1} = +\omega$, а $\omega_{n,\, n+1} = -\omega$. Следовательно,

$$x_{nm} = 0 \quad \text{при} \quad m \neq n \pm 1 \quad \text{и} \quad x_{nm} \neq 0 \quad \text{при} \quad m = n \pm 1. \tag{50,5}$$

Матричные элементы $x_{n,\, n\pm 1}$ можно определить, исходя из соотношений коммутации

$$\hat{p}\hat{x} - \hat{x}\hat{p} = -i\hbar.$$

Раскроем это равенство

$$\sum_k (p_{nk}x_{km} - x_{nk}p_{km}) = -i\hbar\delta_{nm}.$$

Согласно (49,16) и (49,9) $p_{nk} = im\omega_{nk}x_{nk}$. Подставляя $p_{nk}$ в последнее выражение и учитывая (50,5), имеем при $m = n$

$$x_{n,\, n+1}x_{n+1,\, n} - x_{n,\, n-1}x_{n-1,\, n} = \frac{\hbar}{2m\omega}.$$

При этом мы воспользовались тем, что $\omega_{nm} = -\omega_{mn}$, а вместо $\omega_{n,\, n-1}$ и $\omega_{n,\, n+1}$ подставили соответственно $+\omega$ и $-\omega$. Поскольку матрица координаты эрмитова, то $x_{nm} = x^*_{mn}$, и полученное соотношение перепишем в виде

$$|x_{n+1,\, n}|^2 - |x_{n,\, n-1}|^2 = \frac{\hbar}{2m\omega}. \tag{50,6}$$

Из (50,6) ясно, что квадраты модулей матричных элементов образуют арифметическую прогрессию, с разностью $\frac{\hbar}{2m\omega}$. Поскольку все члены прогрессии положительны, она должна начинаться с некоторого положительного члена, которому можно приписать индекс $n = 0$. При этом имеем, очевидно, $x_{1,\,0} \neq 0$, $x_{0,\,-1} \equiv 0$. Следовательно, из (50,6) вытекает равенство

$$|x_{1,\,0}|^2 = \frac{\hbar}{2m\omega}.$$

Соответственно для произвольного целого положительного числа $n$ находим

$$|x_{n,\, n-1}|^2 = \frac{n\hbar}{2m\omega}. \tag{50,7}$$

Из (50,7) непосредственно получаем

$$x_{n,\, n-1} = \sqrt{\frac{n\hbar}{2m\omega}}\, e^{i\beta}; \quad x_{n-1,\, n} = \sqrt{\frac{n\hbar}{2m\omega}}\, e^{-i\beta}, \tag{50,8}$$

где $\beta$ — произвольный фазовый множитель. Воспользовавшись произволом в выборе $\beta$, можно положить его равным нулю. Для матричных элементов, зависящих от времени, соответственно получаем, учитывая (50,2),

$$(x_H)_{n,\,n-1}=\sqrt{\frac{n\hbar}{2m\omega}}\,e^{i\omega t};\quad (x_H)_{n-1,\,n}=\sqrt{\frac{n\hbar}{2m\omega}}\,e^{-i\omega t}. \qquad (50,9)$$

Определим с помощью матриц (50,8) уровни энергии системы $E_n$. Последние определяются как диагональные матричные элементы оператора $\hat{H}$. Из (50,1) следует, что

$$H_{nn}=\frac{1}{2m}\sum_k p_{nk}p_{kn}+\frac{m\omega^2}{2}\sum_k x_{nk}x_{kn}.$$

Подставляя $p_{mn}=im\omega_{mn}x_{mn}$, находим

$$H_{nn}=\frac{m}{2}\left[-\sum_k \omega_{nk}\omega_{kn}x_{nk}x_{kn}+\omega^2\sum x_{nk}x_{kn}\right].$$

Используя очевидные равенства $\omega_{nk}=-\omega_{kn}$; $x_{nk}=x_{kn}$, и учитывая, что матричные элементы $x_{nm}$ отличны от нуля лишь при $m=n\pm 1$, получаем

$$H_{nn}=\frac{m}{2}\left(\sum_k \omega_{nk}^2x_{nk}^2+\omega^2\sum_k x_{nk}^2\right)=\frac{m}{2}\sum_k\left(\omega^2+\omega_{nk}^2\right)x_{nk}^2=$$

$$=\frac{m}{2}\left[\left(\omega^2+\omega_{n,\,n-1}^2\right)x_{n,\,n-1}^2+\left(\omega^2+\omega_{n,\,n+1}^2\right)x_{n,\,n+1}^2\right].$$

Пользуясь (50,8) и $\omega_{n,\,n\pm 1}^2=\omega^2$, имеем окончательно

$$E_n=H_{nn}=m\omega^2\left(\frac{n\hbar}{2m\omega}+\frac{(n+1)\,\hbar}{2m\omega}\right)=\hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right), \qquad (50,10)$$

что естественно совпадает с (10,13).

Вместо операторов $\hat{p}$ и $\hat{x}$ часто оказывается удобным ввести оператор $\hat{a}$ и сопряженный ему оператор $\hat{a}^+$, определяемые соотношениями

$$\begin{aligned}\hat{a}&=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\,\hat{x}+\frac{i}{\sqrt{m\omega\hbar}}\,\hat{p}\right),\\ \hat{a}^+&=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\,\hat{x}-\frac{i}{\sqrt{m\omega\hbar}}\,\hat{p}\right).\end{aligned} \qquad (50,11)$$

Из (50,8) следует, что операторы $\hat{a}$ и $\hat{a}^+$ имеют следующие, отличные от нуля матричные элементы

$$(a^+)_{n,\,n-1}=(a)_{n-1,\,n}=\sqrt{n}, \qquad (50,12)$$

а все остальные матричные элементы равны нулю. Мы видим, следовательно, что у оператора $\hat{a}^+$ отличны от нуля лишь

матричные элементы, соответствующие переходу $n-1 \rightarrow n$, т. е. переходу с увеличением квантового числа $n$ на единицу. У оператора $\hat{a}$ отличны от нуля матричные элементы, соответствующие переходу $n \rightarrow n-1$. В этой связи операторы и называются операторами соответственно поглощения и рождения возбуждения. Для операторов $\hat{a}^+$ и $\hat{a}$ имеют место, как это следует из (50,12), следующие перестановочные соотношения:

$$\hat{a}\hat{a}^+ - \hat{a}^+\hat{a} = 1. \tag{50,13}$$

Оператор $\hat{H}$, выраженный через операторы $\hat{a}$ и $\hat{a}^+$, имеет вид

$$\hat{H} = \frac{\hbar\omega}{2}(\hat{a}^+\hat{a} + \hat{a}\hat{a}^+) \tag{50,14}$$

и с учетом (50,12) мы снова приходим к (50,10). Пользуясь матричным методом, можно также получить выражение для волновых функций осциллятора [1]).

## § 51. Матричные элементы оператора момента [2])

При исследовании свойств момента количества движения, проведенном в § 30 гл. III, мы исходили непосредственно из выражений (30,1) и (30,2) для операторов момента. В настоящем параграфе мы будем основываться только на перестановочных соотношениях (30,3), (30,3′). Оказывается, что такая постановка вопроса носит более общий характер. В частности, конкретные выражения для операторов (30,1) и (30,2) не могут быть использованы при исследовании свойств собственного момента количества движения — спина, который будет рассмотрен в гл. VIII. Между тем, перестановочные соотношения вида (30,3) остаются справедливыми и для собственного момента количества движения (см. § 60). Исследование свойств момента количества движения, основывающееся на соответствующих перестановочных выражениях, удобно проводить в матричной форме. Будем обозначать матрицы, отвечающие проекциям момента количества движения на оси $x$, $y$, $z$, через $\hat{J}_x$, $\hat{J}_y$, $\hat{J}_z$. Изменение обозначений связано с тем, что результаты, полученные в этом параграфе, будут справедливы не только для момента количества движения, связанного с пространственным движением, орбитального момента $\hat{\boldsymbol{l}} = \frac{\hbar}{i}(\boldsymbol{r} \times \nabla)$, но и для момента количества движения,

---

[1]) Л. Д. Ландау и Е. М. Лифшиц, Квантовая механика, Физматгиз, 1963, стр. 95.

[2]) Вопросы, затронутые в этом и следующих параграфах этой главы, более подробно рассмотрены в книгах Л. Д. Ландау и Е. М. Лифшиц, Квантовая механика, Физматгиз, 1963, стр. 111, и Е. Кондон и Г. Шортли, Теория атомных спектров, ИЛ, 1949.

не связанного с пространственным движением — спина, а также для полного момента количества движения (см. § 62). Введем также матрицу $\hat{J}^2$, отвечающую квадрату момента количества движения $\hat{J}^2 = \hat{J}_x^2 + J_y^2 + \hat{J}_z^2$. Итак, возьмем за основу следующие перестановочные соотношения:

$$\left.\begin{aligned} \hat{J}_x\hat{J}_y - \hat{J}_y\hat{J}_x &= i\hbar\hat{J}_z, \\ \hat{J}_y\hat{J}_z - \hat{J}_z\hat{J}_y &= i\hbar\hat{J}_x, \\ \hat{J}_z\hat{J}_x - \hat{J}_x\hat{J}_z &= i\hbar\hat{J}_y. \end{aligned}\right\} \tag{51,1}$$

Прежде всего из этих соотношений следуют правила коммутации (доказательство аналогично приведенному в § 30):

$$\left.\begin{aligned} \hat{J}_x\hat{J}^2 - \hat{J}^2\hat{J}_x &= 0, \\ \hat{J}_y\hat{J}^2 - \hat{J}^2\hat{J}_y &= 0, \\ \hat{J}_z\hat{J}^2 - \hat{J}^2\hat{J}_z &= 0. \end{aligned}\right\} \tag{51,2}$$

Мы выберем то представление, в котором диагональны матрицы $\hat{J}^2$, $\hat{J}_z$ и $\hat{H}$. Действительно, в § 47 мы доказали, что коммутирующие между собой матрицы могут быть одновременно приведены к диагональному виду. Коммутация некоторой матрицы с матрицей $\hat{H}$ выражает закон сохранения соответствующей величины (см. § 32). Поэтому предположение коммутации матриц $\hat{J}^2$ и $\hat{J}_z$ с $\hat{H}$ означает лишь выполнение законов сохранения.

Строки и столбцы рассматриваемых матриц будем нумеровать индексами $m$, $j$, $n$. Вещественное число $m$ определяет проекцию момента количества движения на ось $z$, $J_z = m\hbar$. Число $j$ характеризует величину полного момента, а число $n$ связано с уровнем энергии системы. Поскольку все рассматриваемые матрицы коммутируют с матрицами $\hat{J}^2$ и $\hat{H}$, они диагональны по индексам $j$ и $n$. Следовательно, можем написать, используя обозначения Дирака, матричные элементы интересующих нас матриц в виде (мы будем употреблять круглые скобки)

$$\left.\begin{aligned} (m'j'n' \mid \hat{H} \mid mjn) &= E_{jn}\delta_{jj'}\delta_{mm'}\delta_{nn'}, \\ (m'j'n' \mid \hat{J}^2 \mid mjn) &= J_j^2\delta_{jj'}\delta_{mm'}\delta_{nn'}, \\ (m'j'n' \mid \hat{J}_z \mid mjn) &= m\hbar\delta_{jj'}\delta_{mm'}\delta_{nn'}, \\ (m'j'n' \mid \hat{J}_x \mid mjn) &= (J_x)_{m'm}\,\delta_{jj'}\delta_{nn'}, \\ (m'j'n' \mid \hat{J}_y \mid mjn) &= (J_y)_{m'm}\,\delta_{jj'}\delta_{nn'}. \end{aligned}\right\} \tag{51,3}$$

Здесь через $J_j^2$ мы обозначили собственное значение квадрата момента количества движения. Для дальнейшего нам будет удобно ввести также матрицы $\hat{J}_+ = \hat{J}_x + i\hat{J}_y$ и $\hat{J}_- = \hat{J}_x - i\hat{J}_y$. Очевидно, что эти матрицы, как и исходные матрицы $\hat{J}_x$ и $\hat{J}_y$, диагональны по индексам $j$ и $n$. Учитывая последнее, мы будем в дальнейшем опускать индексы $j$ и $n$.

Нашей задачей является определение спектра возможных значений проекции момента количества движения на произвольно ориентированную ось, установление связи этих величин с абсолютной величиной момента $\sqrt{J_j^2}$ и нахождение матриц $(J_x)_{m'm}$ и $(J_y)_{m'm}$. Прежде всего покажем, что спектр возможных значений проекций момента при заданном полном моменте ограничен сверху и снизу. Для этого воспользуемся матричным соотношением

$$\hat{J}^2 - \hat{J}_z^2 = \hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2.$$

Приравнивая диагональные матричные элементы левой и правой части, получим

$$J_j^2 - m^2\hbar^2 = \sum_k [(J_x)_{mk}(J_x)_{km} + (J_y)_{mk}(J_y)_{km}] = \sum_k |(J_x)_{mk}|^2 + |(J_y)_{mk}|^2. \tag{51,4}$$

При этом мы воспользовались эрмитовостью матриц $J_x$ и $J_y$. Итак, правая часть равенства (51,4) заведомо не отрицательна. Отсюда вытекает неравенство

$$m^2\hbar^2 \leqslant J_j^2 \tag{51,5}$$

или

$$-\sqrt{J_j^2} \leqslant m\hbar \leqslant \sqrt{J_j^2}.$$

Обозначим через $m_1$ и $m_2$ значения квантового числа $m$, отвечающие соответственно наибольшей и наименьшей возможной проекции момента на ось $z$. Спектр возможных значений чисел $m$ найдем с помощью матриц $\hat{J}_+$ и $\hat{J}_-$. Для этого находим коммутатор этих матриц с матрицей $\hat{J}_z$. Пользуясь (51,1), получаем

$$\hat{J}_z\hat{J}_+ - \hat{J}_+\hat{J}_z = \hbar\hat{J}_+, \quad \hat{J}_z\hat{J}_- - \hat{J}_-\hat{J}_z = -\hbar\hat{J}_-. \tag{51,6}$$

Раскроем первое из этих соотношений

$$(J_zJ_+)_{m'm''} - (J_+J_z)_{m'm''} = \hbar(J_+)_{m'm''}.$$

Вычисляя матричный элемент от произведения по правилу (45,6) и учитывая, что матрица $J_z$ диагональна, находим:

$$\hbar(m' - m'')(J_+)_{m'm''} = \hbar(J_+)_{m'm''}. \tag{51,7}$$

Из равенства (51,7) следует, что матрица $\hat{J}_+$ имеет отличные от нуля матричные элементы $(J_+)_{m'm''}$ лишь при условии $m' - m'' = 1$, т. е. для переходов, соответствующих увеличению квантового числа $m$ на единицу $m \to m+1$. Аналогичным образом из второго равенства (51,6) легко показать, что матрица $\hat{J}_-$ имеет отличные от нуля матричные элементы лишь для переходов с уменьшением квантового числа $m$ на единицу, т. е. $m \to m-1$. Таким образом, мы приходим к выводу, что, если при заданном $J_j^2$ оказывается возможным некоторое значение $m\hbar$ проекции момента на ось $z$, то возможны также значения проекции $(m+1)\hbar$, $(m-1)\hbar$, $(m+2)\hbar$, $(m-2)\hbar$ и т. д. Мы выяснили, однако, ранее, что спектр возможных значений числа $m$ должен быть ограничен $m_2 \leqslant m \leqslant m_1$. Положив в равенстве (51,7) $m'' = m_1$ и учитывая, что в нем $m'$ не может принимать значение $m_1 + 1$, мы видим, что оно выполняется только при обращении в нуль матричного элемента $(J_+)_{m_1+1,\, m_1}$. Следовательно,

$$(m_1+1 \,|\, J_+ \,|\, m_1) = 0. \tag{51,8}$$

Аналогичную ситуацию имеем и при минимальных возможных значениях числа $m$. Соответствующее равенство здесь также выполняется за счет обращения в нуль матричного элемента $(J_-)_{m_2-1,\, m_2}$

$$(m_2 - 1 \,|\, J_- \,|\, m_2) = 0. \tag{51,9}$$

Таким образом, возможные значения проекции момента равны $m_2\hbar$, $(m_2+1)\hbar$, $(m_2+2)\hbar$, ..., $(m_1-1)\hbar$, $m_1\hbar$. При этом разность $m_1 - m_2$ может быть равной только целому положительному числу (включая и нуль). Покажем, что значения чисел $m_1$ и $m_2$ определяют величину $J_j^2$. Действительно, матрицу $\hat{J}^2$ можно представить в виде

$$\hat{J}^2 = \hat{J}_-\hat{J}_+ + \hat{J}_z^2 + \hbar\hat{J}_z. \tag{51,10}$$

Беря диагональные матричные элементы от левой и правой частей, соответствующие переходу $m_1 \to m_1$, имеем

$$J_j^2 = \sum_k (J_-)_{m_1 k} (J_+)_{k m_1} + m_1^2\hbar^2 + \hbar^2 m_1.$$

Здесь возможно лишь $k = m_1 + 1$, но при этом обращается в нуль матричный элемент от $J_+$ (51,8). Следовательно,

$$J_j^2 = \hbar^2 m_1 (m_1 + 1).$$

С другой стороны, равенство (51,10) можно переписать также и в такой форме:

$$\hat{J}^2 = \hat{J}_+\hat{J}_- + \hat{J}_z^2 - \hbar\hat{J}_z. \tag{51,11}$$

Если в последнем выражении приравнять диагональные матричные элементы $m_2 \to m_2$, то получим:

$$J_j^2 = \hbar^2 m_2 (m_2 - 1)$$

и, следовательно,

$$m_1 (m_1 + 1) = m_2 (m_2 - 1).$$

Это равенство удовлетворяется при условии $m_2 = m_1 + 1$ и $m_2 = -m_1$. Поскольку, однако, всегда $m_2 \leqslant m_1$, мы должны оставить лишь второй корень $m_2 = -m_1$. Следовательно, максимальная (равная $m_1\hbar$) и минимальная (равная $m_2\hbar$) возможные проекции момента количества движения на ось $z$ равны по абсолютной величине. Квадрат полного момента равен, как мы выяснили, величине $\hbar^2 m_1 (m_1 + 1)$. С другой стороны, мы условились характеризовать эту величину квантовым числом $j$. Поэтому естественно положить $m_1 = j$. При этом имеем:

$$J_j^2 = \hbar^2 j (j + 1). \tag{51,12}$$

Возможные значения проекции момента $J_z$ соответственно равны

$$J_z = j\hbar,\ (j-1)\hbar,\ (j-2)\hbar,\ \ldots,\ (-j+1)\hbar,\ -j\hbar. \tag{51,13}$$

Всего проекция момента принимает $2j + 1$ значений. Заметим, что, поскольку $2j + 1$ — целое положительное число, квантовое число $j$ может принимать лишь целые или полуцелые значения $j = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}$ и т. д. Для орбитального момента количества движения это число, как мы выяснили в § 30, принимает лишь целые значения $j = l$. Мы увидим, однако, в гл. VIII, что для собственного момента количества движения $j$ может принимать и полуцелые значения.

Так как ось $z$ заранее ничем не выделена, то проекция момента количества движения на любую другую ось также дается формулой (51,13). Отметим, что, если число $j$ — целое, то проекции момента на любую ось также целочисленны (в единицах $\hbar$); если же $j$ полуцелое, то проекции момента принимают полуцелые значения.

Найдем теперь матрицы $\hat{J}_x$ и $\hat{J}_y$. Для этого можем воспользоваться, например, соотношением (51,10), взяв диагональные матричные элементы левой и правой части. Учитывая также (51,12), имеем:

$$\hbar^2 j (j + 1) = \sum_k (J_-)_{mk} (J_+)_{km} + \hbar^2 m^2 + \hbar^2 m,$$

причем отличен от нуля лишь член суммы с $k = m + 1$.

Из эрмитовости матриц $J_x$ и $J_y$ следует, что

$$(J_+)_{km} = (J_-)^*_{mk}.$$

Следовательно, предыдущее равенство дает

$$|(J_+)_{m+1, m}|^2 = \hbar^2 [j(j+1) - m(m+1)] = \hbar^2 (j-m)(j+m+1).$$

Для матричного элемента $(J_+)_{m+1, m}$ имеем

$$(m+1|J_+|m) = \hbar \sqrt{(j-m)(j+m+1)}\, e^{i\beta}.$$

Фазу $\beta$ без ограничения общности можно положить равной нулю. Окончательно получаем

$$(m+1|J_+|m) = (J_x + iJ_y)_{m+1, m} = \hbar \sqrt{(j-m)(j+m+1)},$$
$$(m|J_-|m+1) = (J_x - iJ_y)_{m, m+1} = \hbar \sqrt{(j-m)(j+m+1)}, \qquad (51,14)$$

т. е.

$$(J_+)_{m+1, m} = (J_-)_{m, m+1}. \qquad (51,15)$$

Из определения матриц $J_+$ и $J_-$ следует, что

$$\hat{J}_x = \frac{1}{2}(\hat{J}_+ + \hat{J}_-), \quad \hat{J}_y = \frac{1}{2i}(\hat{J}_+ - \hat{J}_-).$$

Используя (51,14), получаем

$$(m+1|J_x|m) = (m|J_x|m+1) = \frac{\hbar}{2}\sqrt{(j-m)(j+m+1)},$$
$$(m+1|J_y|m) = -(m|J_y|m+1) = -\frac{i\hbar}{2}\sqrt{(j-m)(j+m+1)}. \qquad (51,16)$$

В качестве примера выпишем матрицы, которые получаются при $j = 1$:

$$\hat{J}_x = \begin{pmatrix} (J_x)_{11} & (J_x)_{10} & (J_x)_{1,-1} \\ (J_x)_{01} & (J_x)_{00} & (J_x)_{0,-1} \\ (J_x)_{-1,1} & (J_x)_{-1,0} & (J_x)_{-1,-1} \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix},$$

$$\hat{J}_y = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}; \quad \hat{J}_z = \hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \qquad (51,17)$$

$$\hat{J}^2 = \hbar^2 \cdot 2 \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

## § 52. Сложение моментов количества движения

Определим возможные значения момента количества движения $\boldsymbol{J}$, равного сумме двух моментов $\boldsymbol{J} = \boldsymbol{J}_1 + \boldsymbol{J}_2$. Пусть $\boldsymbol{J}_1$ и $\boldsymbol{J}_2$ — моменты количества движения, относящиеся к двум подсистемам, взаимодействием между которыми можно пренебречь.

Это означает, что операторы $\hat{J}_1$ и $\hat{J}_2$ действуют на переменные, относящиеся к разным подсистемам, и, следовательно, коммутируют между собой $\hat{J}_1\hat{J}_2 = \hat{J}_2\hat{J}_1$. Поскольку каждый из операторов $\hat{J}_1$ и $\hat{J}_2$ удовлетворяет перестановочным соотношениям (51,1), то этим же перестановочным соотношениям удовлетворяет и оператор $\hat{J}$. Состояние системы будет задано, если будут заданы квантовые числа $j_1$, $j_2$ и $m_1$, $m_2$, характеризующие полные моменты $J_1^2$ и $J_2^2$ и их проекции на произвольно ориентированную ось $z$ (мы отвлекаемся от других величин, входящих в полный набор, поскольку для дальнейшего они не существенны). При заданных $j_1$ и $j_2$ каждое из чисел $m_1$ и $m_2$ пробегает соответственно $(2j_1 + 1)$ и $(2j_2 + 1)$ значений. Следовательно, заданным числам $j_1$ и $j_2$ отвечает $(2j_1 + 1)(2j_2 + 1)$ состояний. Однако вместо четырех чисел $j_1$, $j_2$, $m_1$, $m_2$ состояние системы можно характеризовать числами $j_1$, $j_2$, $j$ и $m$, где $j$ и $m$ — квантовые числа, отвечающие полному моменту $\hat{J}^2$ и его проекции на ось $z$. Это означает, по-существу, переход от представления $j_1$, $j_2$, $m_1$, $m_2$ к представлению $j_1$, $j_2$, $j$, $m$. Действительно, операторы, отвечающие последним четырем величинам, с таким же успехом могут входить в полный набор, как и операторы, отвечающие величинам $j_1$, $j_2$, $m_1$, $m_2$. Так как имеет место очевидное равенство $\hat{J}_z = \hat{J}_{1z} + \hat{J}_{2z}$, то квантовое число $m$ равно сумме $m = m_1 + m_2$. Для квадратов моментов, разумеется, такого простого соотношения уже не существует и нам следует определить возможные значения числа $j$ при заданных $j_1$ и $j_2$. Прежде всего заметим, что максимальное значение числа $j$ получится, если мы возьмем наибольшее $m_1$, равное $j_1$, и наибольшее $m_2$, равное $j_2$. Следовательно, в этом случае $j = j_1 + j_2$. Возьмем, далее, следующее возможное значение числа $m$, равное $m = j_1 + j_2 - 1$. Такое значение числа $m$ может реализоваться либо при $m_1 = j_1$, $m_2 = j_2 - 1$, либо при $m_1 = j_1 - 1$, $m_2 = j_2$. Таким образом, данному значению $m = j_1 + j_2 - 1$ отвечают два независимых состояния. Следовательно, данному $m$ должно отвечать два возможных значения числа $j$. Но так как наибольшее возможное значение $j$ равно $j_1 + j_2$ и так как число $m$ не может быть больше числа $j$, то ясно, что выбранному $m$ могут отвечать лишь $j = j_1 + j_2$ и $j = j_1 + j_2 - 1$. Выбирая $m$ еще на единицу меньше, мы получим три состояния, отвечающие данному $m$:

1) $m_1 = j_1$, $m_2 = j_2 - 2$;
2) $m_1 = j_1 - 1$, $m_2 = j_2 - 1$;
3) $m_1 = j_1 - 2$, $m_2 = j_2$.

Аналогично предыдущему приходим к тому, что число $j$ может принимать значения $j = j_1 + j_2$, $j = j_1 + j_2 - 1$ и $j = j_1 + j_2 - 2$.

Продолжая эти рассуждения и дальше, мы получим, что при данных $j_1$ и $j_2$ число $j$ может принимать значения:

$$j = j_1 + j_2; \quad j_1 + j_2 - 1; \quad j_1 + j_2 - 2, \ \ldots, \ j_1 - j_2. \tag{52,1}$$

Всего число $j$ принимает $2j_2 + 1$ значений (при условии, что $j_2 \leqslant j_1$, в противном случае индексы 1 и 2 нужно поменять местами). Полное число состояний, отвечающих данным $j_1$ и $j_2$, равно

$$\sum_{j=j_1-j_2}^{j=j_1+j_2} (2j+1) = (2j_1+1)(2j_2+1),$$

как и должно быть. Приведенный результат был получен ранее в так называемой «векторной модели», введенной еще до появления квантовой механики. В векторной модели принимается, что длина вектора $j$, образованного сложением двух векторов момента $j_1$ и $j_2$, может изменяться скачкообразно на единицу. Она максимальна, когда эти векторы «параллельны» $j = j_1 + j_2$, и минимальна, когда они «антипараллельны» $j = j_1 - j_2$.

В том случае, когда нужно сложить три и более момента количества движения, мы должны применять выведенное правило, складывая их попарно.

Наряду с возможными значениями $j$ можно найти и вероятность того, что полный момент системы равен тому или иному возможному значению $j$ при заданных $j_1$ и $j_2$. Для этого нужно, согласно общим правилам (§ 21), разложить волновую функцию системы, описывающую состояние с заданными значениями $j_1$, $j_2$, $m_1$, $m_2$, по волновым функция $\psi_{jm}$ состояний с заданными $j_1$, $j_2$, $j$, $m$. Поскольку исходная система разбита на две невзаимодействующие подсистемы, то ее волновая функция с заданными $j_1$, $m_1$; $j_2$, $m_2$ может быть представлена в виде произведения двух функций, относящихся соответственно к каждой из подсистем $\psi_{j_1j_2m_1m_2} = \psi_{j_1m_1}(1)\,\psi_{j_2m_2}(2)$. Упомянутое разложение имеет вид

$$\psi_{j_1m_1}\psi_{j_2m_2} = \sum_j C^j_{m_1m_2}\psi_{j,\, m_1+m_2}. \tag{52,2}$$

Квадраты модулей коэффициентов $C^j_{m_1m_2}$ определяют искомые вероятности. Заметим, что поскольку преобразование волновых функций от одного представления к другому осуществляется унитарными матрицами, мы можем разложение, обратное (52,2), написать как

$$\psi_{jm} = \sum_{m_2} \left(C^j_{m-m_2,\, m_2}\right)^* \psi_{j_1,\, m-m_2}(1)\,\psi_{j_2m_2}(2). \tag{52,3}$$

Коэффициенты $C^j_{m_1m_2}$ были вычислены Вигнером методом теории групп. Довольно полную таблицу этих коэффициентов

читатель найдет, например, в книге Е. Кондона и Г. Шортли[1]). Мы же ограничимся рассмотрением наиболее простого случая, когда один из моментов равен половине, а другой произволен. Итак, будем считать, что $j_2 = \frac{1}{2}$. При данном $j_2$ число $m_2$ пробегает лишь два значения, а именно: $m_2 = \frac{1}{2}$ и $m_2 = -\frac{1}{2}$. Соответственно разложение (52,3) мы можем переписать, опуская все лишние индексы в виде

$$\psi_{jm} = C_{1/2}\psi_{j_1,\, m-1/2}(1)\,\psi_{1/2\, 1/2}(2) + C_{-1/2}\psi_{j_1,\, m+1/2}(1)\,\psi_{1/2,\, -1/2}(2). \qquad (52,4)$$

Подействуем на левую и правую части этого разложения оператором $\hat{\boldsymbol{J}}^2 = (\hat{\boldsymbol{J}}_1 + \hat{\boldsymbol{J}}_2)^2 = \hat{\boldsymbol{J}}_1^2 + \hat{\boldsymbol{J}}_2^2 + 2\hat{\boldsymbol{J}}_1\hat{\boldsymbol{J}}_2$. Скалярное произведение, стоящее справа, удобно несколько преобразовать, так что

$$\hat{\boldsymbol{J}}^2 = \hat{\boldsymbol{J}}_1^2 + \hat{\boldsymbol{J}}_2^2 + (\hat{J}_{1x} + i\hat{J}_{1y})(\hat{J}_{2x} - i\hat{J}_{2y}) + (\hat{J}_{1x} - i\hat{J}_{1y})(\hat{J}_{2x} + i\hat{J}_{2y}) + \\ + 2\hat{J}_{1z}\hat{J}_{2z} = \hat{\boldsymbol{J}}_1^2 + \hat{\boldsymbol{J}}_2^2 + \hat{J}_{1+}\hat{J}_{2-} + \hat{J}_{1-}\hat{J}_{2+} + 2\hat{J}_{1z}\hat{J}_{2z}. \qquad (52,5)$$

При действии этим оператором на левую часть равенства (52,4) получим $\hbar^2 j(j+1)$. При действии на правую часть удобно представить оператор $\hat{\boldsymbol{J}}^2$ в виде (52,5), причем нужно помнить, что каждый из операторов $\hat{\boldsymbol{J}}_1$, $\hat{\boldsymbol{J}}_2$ действует лишь на волновую функцию соответствующей подсистемы. Из матричных соотношений (51,14) следует, что

$$\hat{J}_{2-}\psi_{1/2,\, -1/2}(2) = \hat{J}_{2+}\psi_{1/2\, 1/2}(2) = 0,$$

$$\hat{J}_{2-}\psi_{1/2\, 1/2}(2) = \hbar\psi_{1/2,\, -1/2}(2),$$

$$\hat{J}_{2+}\psi_{1/2,\, -1/2}(2) = \hbar\psi_{1/2\, 1/2}(2),$$

$$\hat{J}_{1+}\psi_{j_1,\, m-1/2}(1) = \hbar\sqrt{\left(j_1 - m + \frac{1}{2}\right)\left(j_1 + m + \frac{1}{2}\right)}\,\psi_{j_1,\, m+1/2}(1),$$

$$\hat{J}_{1-}\psi_{j_1,\, m+1/2}(1) = \hbar\sqrt{\left(j_1 - m + \frac{1}{2}\right)\left(j_1 + m + \frac{1}{2}\right)}\,\psi_{j_1,\, m-\frac{1}{2}}(1).$$

Используя эти соотношения, мы получим следующее уравнение:

$$j(j+1)\psi_{jm} = \left[C_{1/2}\left(j_1(j_1+1) + \frac{1}{4} + m\right) + \right. \\ \left. + C_{-1/2}\sqrt{\left(j_1 + m + \frac{1}{2}\right)\left(j_1 - m + \frac{1}{2}\right)}\right]\psi_{j_1,\, m+1/2}(1)\,\psi_{1/2\, 1/2}(2) + \\ + \left[C_{-1/2}\left(j_1(j_1+1) + \frac{1}{4} - m\right) + \right. \\ \left. + C_{1/2}\sqrt{\left(j_1 - m + \frac{1}{2}\right)\left(j_1 + m + \frac{1}{2}\right)}\right]\psi_{j_1,\, m+1/2}(1)\,\psi_{1/2,\, -1/2}(2).$$

[1]) См. ссылку на стр. 200.

Подставляя в левую часть вместо $\psi_{jm}$ опять разложение (52,4) и приравнивая коэффициенты при одинаковых функциях $\psi(1)\psi(2)$, мы получим два уравнения относительно $C_{1/2}$ и $C_{-1/2}$. Из этих двух уравнений, однако, лишь одно будет независимым. Оно дает

$$C_{-1/2} = C_{1/2}\frac{j(j+1) - j_1(j_1+1) - \frac{1}{4} - m}{\sqrt{\left(j_1 + m + \frac{1}{2}\right)\left(j_1 - m + \frac{1}{2}\right)}}. \tag{52,6}$$

Другое соотношение получим, если учтем, что квадраты модулей этих коэффициентов равны соответствующим вероятностям

$$|C_{-1/2}|^2 + |C_{1/2}|^2 = 1. \tag{52,7}$$

Соотношения (52,6) и (52,7) определяют нам коэффициенты $C_{1/2}$ и $C_{-1/2}$ с точностью до несущественного фазового множителя $e^{i\alpha}$ (фазу выбираем в соответствии с принятой в таблицах коэффициентов $C^j_{m_1m_2}$; см. Кондон и Шортли). Поскольку при $j_2 = \frac{1}{2}$ полный момент $j$ может принимать лишь два значения $j_1 + \frac{1}{2}$ и $j_1 - \frac{1}{2}$, получаем следующие значения коэффициентов $C^j_{m_1m_2}$ (см. таблицу):

**Таблица коэффициентов $C^j_{m_1m_2}$**

| $j$ | $m_2 = \frac{1}{2}$ | $m_2 = -\frac{1}{2}$ |
|---|---|---|
| $j_1 + \frac{1}{2}$ | $\sqrt{\frac{j_1 + m + \frac{1}{2}}{2j_1 + 1}}$ | $\sqrt{\frac{j_1 - m + \frac{1}{2}}{2j_1 + 1}}$ |
| $j_1 - \frac{1}{2}$ | $-\sqrt{\frac{j_1 - m + \frac{1}{2}}{2j_1 + 1}}$ | $\sqrt{\frac{j_1 + m + \frac{1}{2}}{2j_1 + 1}}$ |

ГЛАВА VII

# ТЕОРИЯ ВОЗМУЩЕНИЙ

## § 53. Теория возмущений, не зависящих от времени

Уравнение Шредингера является линейным дифференциальным уравнением в частных производных с переменными коэффициентами. Его точное решение может быть найдено лишь для отдельных, наиболее простых задач, часть которых была рассмотрена в предыдущих параграфах.

Однако в большинстве случаев получение точного решения уравнения Шредингера сопряжено с огромными математическими трудностями. Поэтому в квантовой механике разработан ряд приближенных методов его решения. К ним относится рассмотренный уже выше метод квазиклассического приближения. Другим важнейшим приближенным методом решения уравнения Шредингера является так называемая теория возмущений. Термин «возмущение» и идеи этого метода, представляющего некоторый вариант известного в математике метода разложения по малому параметру, были введены в квантовую механику по аналогии с методом возмущений классической механики, игравшим особенно большую роль в решении задач небесной механики.

Мы изложим в общем виде теорию возмущений. Ее приложения к решению конкретных задач будут проиллюстрированы в дальнейшем на многочисленных примерах.

Рассмотрим прежде всего простейший случай квантовомеханической системы, у которой оператор Гамильтона $\hat{H}$ не зависит от времени явно.

Предположим, что оператор $\hat{H}$ можно представить в виде

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}', \tag{53,1}$$

где оператор $\hat{H}'$ можно считать малым по сравнению с оператором $\hat{H}_0$ (что́ именно понимается под словом «малый», поясним ниже). Тогда уравнение Шредингера приобретает вид

$$(\hat{H}_0 + \hat{H}')\,\psi = E\psi. \tag{53,2}$$

Предположим далее, что решение уравнения

$$\hat{H}_0\psi^{(0)} = E^{(0)}\psi^{(0)} \tag{53,3}$$

известно. Тогда для решения уравнения (53,2) можно воспользоваться методом, представляющим по существу метод последовательных приближений. В дальнейшем гамильтониан $\hat{H}_0$ и волновую функцию $\psi^{(0)}$ будем именовать невозмущенными, а оператор $\hat{H}'$ — оператором возмущения. «Малость» оператора $\hat{H}'$ означает, что под действием возмущения состояние системы должно изменяться сравнительно слабо. Нашей задачей является нахождение решения уравнения Шредингера в предположении, что волновая функция $\psi^{(0)}$ невозмущенной системы известна. Мы будем рассматривать возмущения состояний, принадлежащих к дискретному спектру оператора $\hat{H}_0$. При этом, однако, оператор $\hat{H}_0$ может помимо собственных значений, принадлежащих дискретному спектру, иметь и собственные значения непрерывного спектра.

Решение уравнения (53,2) ищем в виде ряда по собственным функциям оператора $\hat{H}_0$

$$\psi(x) = \sum_k c_k\psi_k^{(0)}. \tag{53,4}$$

Если оператор $\hat{H}_0$ обладает также и непрерывным спектром, то мы должны добавить к сумме (53,4) соответствующий интеграл, взятый по непрерывному спектру. Подставляя сумму (53,4) в уравнение (53,2) с учетом (53,3), получаем:

$$\sum_k \hat{H}'c_k\psi_k^{(0)} = \sum_k c_k\left(E - E_k^{(0)}\right)\psi_k^{(0)}.$$

Умножим левую и правую части уравнения на $\psi_m^{(0)*}$ и проинтегрируем его по всей области изменения независимых переменных. Воспользовавшись ортогональностью функций $\psi_k^{(0)}$, находим

$$c_m\left(E - E_m^{(0)}\right) = \sum_k H'_{mk}c_k, \qquad m = 1,\ 2,\ 3,\ \ldots, \tag{53,5}$$

где

$$H'_{mk} = \int \psi_m^{(0)*}\hat{H}'\psi_k^{(0)}\,dV \tag{53,6}$$

есть матричный элемент оператора возмущения, вычисленный с помощью волновых функций невозмущенной задачи. Система уравнений (53,5) в точности эквивалентна уравнению (53,2). Она представляет уравнение Шредингера в энергетическом представлении. Воспользуемся теперь нашим предположением о малости оператора возмущения. При этом уровни энергии и волновые функции в нашей задаче будут близки к соответствующим

значениям невозмущенной системы. Поэтому будем искать их в виде следующего ряда:

$$\left.\begin{aligned} E &= E^{(0)} + E^{(1)} + E^{(2)} + \ldots, \\ c_m &= c_m^{(0)} + c_m^{(1)} + c_m^{(2)} + \ldots \end{aligned}\right\} \tag{53,7}$$

Здесь $E^{(0)}$, $c_m^{(0)}$ — невозмущенные значения. Поправки $E^{(1)}$, $c_m^{(1)}$ того же порядка малости, что и возмущение, $E^{(2)}$, $c_m^{(2)}$ — квадратичны по возмущению и т. д.

Найдем поправку к $n$-му уровню энергии и соответственно к $n$-й собственной функции невозмущенной задачи, ограничиваясь при этом членами второго порядка малости:

$$\left.\begin{aligned} E &= E_n^{(0)} + E_n^{(1)} + E_n^{(2)}, \\ c_m &= c_m^{(0)} + c_m^{(1)} + c_m^{(2)}. \end{aligned}\right\} \tag{53,8}$$

В этом параграфе мы будем предполагать, что $n$-й уровень энергии невозмущенной задачи не вырожден. Для остальных уровней это предположение не обязательно. В нулевом приближении волновая функция совпадает с функцией $\psi_n^{(0)}$. Это дает

$$\psi = \sum_k c_k^{(0)} \psi_k^{(0)} = \psi_n^{(0)}, \quad \text{т. е.} \quad c_k^{(0)} = \delta_{kn}. \tag{53,9}$$

Подставляя (53,8) в уравнение (53,5), получаем:

$$\left(\delta_{mn} + c_m^{(1)} + c_m^{(2)}\right)\left(E_n^{(0)} - E_m^{(0)} + E_n^{(1)} + E_n^{(2)}\right) = \sum_k H'_{mk}\left(\delta_{kn} + c_k^{(1)} + c_k^{(2)}\right). \tag{53,10}$$

В уравнении (53,10) следует приравнять члены одного порядка малости. Для членов первого порядка малости получаем соотношение

$$\left(E_n^{(0)} - E_m^{(0)}\right) c_m^{(1)} + E_n^{(1)} \delta_{mn} = \sum_k H'_{mk} \delta_{kn} = H'_{mn}. \tag{53,11}$$

Полагая $m = n$, находим:

$$E_n^{(1)} = H'_{nn} = \int \psi_n^{(0)*} \hat{H}' \psi_n^{(0)}\, dV. \tag{53,12}$$

Мы видим, что поправка первого порядка к уровню энергии равна среднему значению энергии возмущения в невозмущенном состоянии $\psi_n^{(0)}$. Из уравнения (53,11) при $m \neq n$ находим поправку первого порядка к волновой функции

$$c_m^{(1)} = \frac{H'_{mn}}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}. \tag{53,13}$$

Выпишем теперь уравнение для членов второго порядка малости:

$$\left(E_n^{(0)} - E_m^{(0)}\right) c_m^{(2)} + c_m^{(1)} E_n^{(1)} + E_n^{(2)} \delta_{mn} = \sum_k H'_{mk} c_k^{(1)}. \tag{53,14}$$

Полагая $m \neq n$, находим из уравнения (53,14) поправку второго порядка малости к невозмущенной волновой функции

$$c_m^{(2)} = \frac{1}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \left( \sum_k H'_{mk} c_k^{(1)} - E_n^{(1)} c_m^{(1)} \right). \tag{53,15}$$

Значение амплитуд $c_n^{(1)}$ и $c_n^{(2)}$ можно получить из условия нормировки, которое с учетом (53,4) запишется в виде

$$\sum_k |c_k|^2 = 1. \tag{53,16}$$

Подставляя в (53,16) разложение (53,8), получим

$$\sum_k |\delta_{kn} + c_k^{(1)} + c_k^{(2)}|^2 = 1. \tag{53,17}$$

Приравниваем слева и справа величины одного порядка малости. Тогда имеем

$$\left. \begin{aligned} c_n^{(1)} + c_n^{(1)*} &= 0, \\ c_n^{(2)} + c_n^{(2)*} + \sum_k |c_k^{(1)}|^2 &= 0. \end{aligned} \right\} \tag{53,18}$$

Из соотношений (53,18) следует, что мнимые части амплитуды $c_n^{(1)}$ и $c_n^{(2)}$ являются произвольными величинами. Появление этого произвола связано с тем, что волновая функция определена с точностью до фазового множителя $e^{i\alpha}$, где $\alpha$ также можно представить в виде ряда. В соответствии с этим, без ограничения общности, можем считать

$$\left. \begin{aligned} c_n^{(1)} &= 0, \\ c_n^{(2)} &= -\frac{1}{2} \sum_k{}' \frac{|H'_{kn}|^2}{\left(E_n^{(0)} - E_k^{(0)}\right)^2}. \end{aligned} \right\} \tag{53,19}$$

Здесь штрих у суммы означает, что при суммировании исключается член с $k = n$.

Из (53,15) находим $c_m^{(2)}$

$$c_m^{(2)} = \sum_k{}' \frac{H'_{mk} H'_{kn}}{\left(E_n^{(0)} - E_k^{(0)}\right)\left(E_n^{(0)} - E_m^{(0)}\right)} - \frac{H'_{mn} H'_{nn}}{\left(E_n^{(0)} - E_m^{(0)}\right)^2}, \quad m \neq n \tag{53,20}$$

Полагая в уравнении (53,14) $m = n$, находим поправку второго порядка к уровню энергии системы:

$$E_n^{(2)} = \sum_k{}' \frac{H'_{nk} H'_{kn}}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}}. \tag{53,21}$$

Поправка второго порядка к основному уровню энергии оказывается отрицательной независимо от характера возмущения. Таким образом, с точностью до членов второго порядка малости энергия системы, как это следует из (53,8), (53,12) и (53,21), равна

$$E = E_n^{(0)} + H'_{nn} + \sum_k{}' \frac{|H'_{nk}|^2}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}}. \tag{53,22}$$

Аналогичным образом получаем выражение для возмущенной волновой функции системы

$$\psi = \psi_n^{(0)} + \sum_k{}' \frac{H'_{kn}}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} \psi_k^{(0)} + \ldots \tag{53,23}$$

(Эту формулу мы выписали лишь с точностью до членов первого порядка малости.)

Из выражения (53,23) следует, что поправка первого порядка будет действительно мала, если выполняется неравенство

$$|H'_{kn}| \ll |E_n^{(0)} - E_k^{(0)}|. \tag{53,24}$$

Таким образом, метод теории возмущений, развитый выше, применим, если матричные элементы оператора возмущения малы по сравнению с расстояниями между соответствующими энергетическими уровнями невозмущенной системы.

## § 54. Теория возмущений при наличии вырождения

Предположим теперь, что собственные значения невозмущенного оператора $\hat{H}_0$ вырождены и кратность вырождения $n$-го уровня (с энергией $E_n^{(0)}$) равна $s$.

Это означает, что состояние невозмущенной системы с энергией $E_n$ описывается взаимно ортогональными волновыми функциями $\psi_{n1}^{(0)}, \ldots, \psi_{ns}^{(0)}$ или их произвольными линейными комбинациями, которые можно выбрать так, чтобы волновые функции были по-прежнему ортогональны. При наложении возмущения собственные значения оператора $\hat{H}_0$, как правило, оказываются невырожденными или во всяком случае кратность вырождения уменьшается. Это обстоятельство тесно связано с самой природой вырождения. Мы указывали уже в § 35, что вырождение

всегда связано с симметрией гамильтониана по отношению к определенному классу преобразований координат системы. Возмущение, как правило, не обладает той же симметрией. Поэтому и результирующий гамильтониан возмущенной системы не будет иметь прежней симметрии и его уровни энергии не будут вырожденными. Таким образом, возмущение снимает вырождение. Например, при рассмотрении движения в центрально-симметричном поле мы видели, что $(2l+1)$-кратное вырождение уровней энергии связано с симметрией (неизменностью) гамильтониана по отношению к вращению системы вокруг центра сил. Если поместить теперь систему во внешнее поле, то полный гамильтониан уже не будет обладать сферической симметрией. Возмущение (в данном случае внешнее поле) снимает $(2l+1)$-кратное вырождение по направлениям момента количества движения.

После наложения возмущения вырожденный уровень энергии расщепляется на $s$ близких уровней, каждому из которых соответствует своя волновая функция, являющаяся линейной комбинацией функций $\psi_{nr}^{(0)}$

$$\psi = \sum_{m,r} c_{mr}\psi_{mr}^{(0)}. \tag{54,1}$$

Мы по-прежнему будем считать возмущение малым и будем искать в первом приближении теории возмущений близкие уровни энергии (их часто называют подуровнями), на которые расщепляется вырожденный уровень. Одновременно мы будем искать соответствующую совокупность волновых функций в нулевом приближении. Именно мы должны найти в нулевом приближении правильные выражения для амплитуд $c_{mr}$ в сумме (54,1), чтобы линейная комбинация (54,1) отвечала бы одному из подуровней, на которые расщепляется исходный уровень энергии и уже мало изменялась при учете возмущения в следующем приближении.

Рассмотрим вначале случай двукратного вырождения. В этом случае формула (54,1) дает

$$\psi = c_1\psi_1 + c_2\psi_2.$$

Подставляя это значение в уравнении Шредингера (53,2), находим

$$-c_1(E-E^{(0)}) + H_{12}c_2 + H_{11}c_1 = 0,$$
$$c_1H_{21} - c_2(E-E^{(0)}) + c_2H_{22} = 0.$$

Полагая $E = E^{(0)} + E^{(1)}$, получаем систему однородных уравнений

$$(H_{11} - E^{(1)})\,c_1 + H_{12}c_2 = 0,$$
$$H_{21}c_1 + (H_{22} - E^{(1)})\,c_2 = 0.$$

Условием разрешимости этой системы служит равенство нулю определителя

$$\begin{vmatrix} H_{11}-E^{(1)} & H_{12} \\ H_{21} & H_{22}-E^{(1)} \end{vmatrix} = 0,$$

откуда

$$(H_{11}-E^{(1)})(H_{22}-E^{(1)}) = |H_{12}|^2,$$

или

$$E^{(1)}_{1,2} = \frac{H_{11}+H_{22}}{2} \pm \frac{1}{2}\sqrt{(H_{11}-H_{22})^2+4|H_{12}|^2}.$$

Мы видим, что вырожденный уровень расщепляется на два уровня, отвечающих двум различным знакам перед корнем.

Если

$$|H_{12}|^2 \ll (H_{11}-H_{22})^2,$$

то мы возвращаемся к случаю двух независимых уровней, энергии которых равны

$$E_1 = E^{(0)}+E^{(1)} = E^{(0)}+H_{11}+\frac{|H_{12}|^2}{H_{11}-H_{22}},$$

$$E_2 = E^{(0)}+H_{22}-\frac{|H_{12}|^2}{H_{11}-H_{22}}.$$

Если же

$$|H_{12}|^2 \gg H_{11}-H_{22},$$

то мы получаем

$$E_1 = E^{(0)}+\frac{H_{11}+H_{22}}{2}+|H_{12}|^2+\frac{(H_{11}-H_{22})^2}{8|H_{12}|},$$

$$E_2 = E^{(0)}+\frac{H_{11}+H_{22}}{2}-|H_{12}|^2-\frac{(H_{11}-H_{22})^2}{8|H_{12}|}.$$

Совершенно аналогичные результаты получаются и в общем случае $n$-кратного вырождения.

Подставляя (54,1) в уравнение Шредингера (53,2), мы получим, аналогично (53,5),

$$c_{mp}\left(E-E_m^{(0)}\right) = \sum_{k,r} H'_{mp;\,kr}c_{kr}, \tag{54,2}$$

где обозначено

$$H'_{mp;\,kr} = \int \psi_{mp}^{(0)*}\hat{H}'\psi_{kr}^{(0)}\,dV.$$

В уравнении (54,2) мы должны положить $m=n$ и приравнять друг другу члены первого порядка малости. В соответствии с этим мы должны взять амплитуды $c_{kr}$ в нулевом приближении. Но в нулевом приближении волновая функция $\psi$ есть суперпозиция функции $\psi_{nr}^{(0)}$, т. е. $c_{kr}^{(0)}$ отличны от нуля лишь при $k=n$.

Написав энергию $E$ в уравнении (54,2) в виде $E = E_n^{(0)} + E^{(1)}$, получаем

$$c_p^{(0)} E^{(1)} = \sum_{r=1}^{s} H'_{pr} c_r^{(0)} \tag{54,3}$$

(мы опустили в обозначениях фиксированный индекс $n$).

Система однородных уравнений (54,3) имеет нетривиальное решение лишь в том случае, если обращается в нуль детерминант, составленный из коэффициентов при неизвестных, т. е. при условии

$$\begin{vmatrix} H'_{11} - E^{(1)} & H'_{12} & \ldots H'_{1s} \\ H'_{21} & H'_{22} - E^{(1)} & \ldots H'_{2s} \\ H'_{s1} \ldots\ldots & \ldots\ldots & H'_{ss} - E^{(1)} \end{vmatrix} = 0. \tag{54,4}$$

Уравнение (54,4) называется секулярным или вековым уравнением. Секулярное уравнение является уравнением $s$-го порядка относительно $E^{(1)}$ и имеет, следовательно, $s$ корней. Разрешив его относительно $E^{(1)}$, находим для этой величины $s$ значений. Это означает, что $n$-й уровень энергии расщепляется на $s$-подуровней $E_n^{(0)} + E_1^{(1)}$, $E_n^{(0)} + E_2^{(1)}$, ..., $E_n^{(0)} + E_s^{(1)}$. В частном случае некоторые корни секулярного уравнения могут оказаться равными между собой. При этом возмущение только частично снимает вырождение в системе.

Подставляя найденные значения $E^{(1)}$ в уравнение (54,3), мы можем определить амплитуды $c_{nr}^{(0)}$, соответствующие данной поправке к энергии $E^{(1)}$. Тем самым мы найдем в нулевом приближении правильные волновые функции, отвечающие энергетическим подуровням, на которые расщепляется уровень $E_n^{(0)}$. Эти волновые функции уже слабо искажаются под действием возмущения.

Изложенный метод применим и в том случае, когда собственные значения оператора $\hat{H}_0$ не вырождены, однако расположены так близко друг к другу, что неравенство (53,24) не выполняется [1]).

В качестве примера применения методов, изложенных в этом и предыдущем параграфах, мы рассмотрим смещение основного энергетического уровня водородоподобного атома, а также расщепление первого возбужденного уровня, обусловленное конечными размерами ядра.

При рассмотрении водородоподобных атомов мы считали, что электрон находится в кулоновском поле ядра. При этом,

---

[1]) Подробнее см. В. А. Фок, Начала квантовой механики, Кубуч, 1932, стр. 92.

однако, не учитывалось отличие поля от кулоновского в области самого ядра. Будем считать ядро равномерно заряженным шариком радиуса $r_0$. Тогда потенциальная энергия электрона при $r \leqslant r_0$ имеет вид [см. (9,4), ч. IV]

$$U(r) = -\frac{Ze^2}{r_0}\left(\frac{3}{2} - \frac{1}{2}\frac{r^2}{r_0^2}\right). \tag{54,5}$$

Гамильтонианом возмущения будет отличие потенциальной энергии электрона от ее значения, взятого для чистого кулоновского поля

$$\hat{H}' = \begin{cases} -\dfrac{Ze^2}{r_0}\left(\dfrac{3}{2} - \dfrac{1}{2}\dfrac{r^2}{r_0^2}\right) + \dfrac{Ze^2}{r}, & r \leqslant r_0 \\ 0, & r > r_0. \end{cases} \tag{54,6}$$

Определим поправку первого приближения к основному уровню энергии:

$$E^{(1)} = H'_{00} = \int \psi_0^* \hat{H}' \psi_0 \, dV. \tag{54,7}$$

Волновая функция основного состояния согласно (38,22)

$$\psi_0 = 2\sqrt{\frac{Z^3}{a^3}}\, e^{-\frac{Zr}{a}} \frac{1}{\sqrt{4\pi}}. \tag{54,8}$$

Подставляя (54,8) в (54,7), получаем

$$E^{(1)} = \frac{Z^3}{a^3} 4 \int_0^{r_0} e^{-\frac{2Zr}{a}} \left[\frac{Ze^2}{r} - \frac{Ze^2}{r_0}\left(\frac{3}{2} - \frac{1}{2}\frac{r^2}{r_0^2}\right)\right] r^2 \, dr. \tag{54,9}$$

Так как радиус первой боровской орбиты $a \sim 10^{-8}$ *см*, а $r_0 \sim$ $\sim 10^{-12}$ *см*, то показатель экспоненты в (54,9) очень мал, и экспоненту можно заменить на единицу. Вычисляя интеграл (54,9), находим

$$E^{(1)} = \frac{2}{5}\frac{Z^4 e^2}{a}\left(\frac{r_0}{a}\right)^2 = -\frac{4}{5} E_1^{(0)} \left(\frac{r_0}{a}\right)^2 Z^2. \tag{54,10}$$

Даже для самых тяжелых атомов $Z \sim 100$ отношение $\dfrac{E^{(1)}}{E_1^{(0)}} \sim 10^{-4}$.

Рассмотрим теперь первый возбужденный уровень $n = 2$. Как мы установили в § 38, этот уровень будет 4-кратно вырожден (состояния $\psi_{200}$, $\psi_{211}$, $\psi_{210}$, $\psi_{21,-1}$). Будем нумеровать эти волновые функции индексом $s$, соответственно $s = 1, 2, 3, 4$. Уже из общих соображений ясно, что возмущение частично снимет вырождение. Действительно, в кулоновском поле мы имеем вырождение по двум квантовым числам $l$ и $m$. Вырождение по

квантовому числу $l$ специфично для кулоновского поля. Вырождение же по магнитному квантовому числу $m$ имеет место в произвольном поле с центральной симметрией. Ввиду того, что поле при учете возмущения уже не будет строго кулоновским, хотя и останется центральным, вырождение по квантовому числу $l$ снимется.

Таким образом, мы можем ожидать, что уровень с $n = 2$ расщепится на 2 уровня с $n = 2$, $l = 0$ и $n = 2$, $l = 1$. Покажем, что расчет действительно приводит к этому расщеплению.

Секулярное уравнение в нашем случае будет иметь вид

$$\begin{vmatrix} H'_{11}-E^{(1)} & H'_{12} & H'_{13} & H'_{14} \\ H'_{21} & H'_{22}-E^{(1)} & H'_{23} & H'_{24} \\ H'_{31} & H'_{32} & H'_{33}-E^{(1)} & H'_{34} \\ H'_{41} & H'_{42} & H'_{43} & H'_{44}-E^{(1)} \end{vmatrix} = 0. \qquad (54,11)$$

Матричные элементы берутся по функциям $\psi_{nlm}$ : $\psi_1 = \psi_{200}$, $\psi_2 = \psi_{211}$, $\psi_3 = \psi_{210}$ и $\psi_4 = \psi_{21,-1}$.

Ввиду того, что оператор возмущения $\hat{H}'$ (54,6) зависит только от координаты $r$, все недиагональные матричные элементы в (54,11) обращаются в нуль из-за ортогональности сферических функций (30,18). Действительно, при интегрировании по угловым переменным получим

$$\int Y^*_{l'm'} Y_{lm} \sin\vartheta \, d\vartheta \, d\varphi = \delta_{ll'}\delta_{mm'}.$$

Для диагональных матричных элементов, используя (38,22)—(38,24), получим (интеграл по угловым переменным равен единице)

$$H'_{11} = \frac{Z^3}{2a^3} \int_0^{r_0} \left(1 - \frac{Zr}{2a}\right)^2 e^{-\frac{Zr}{a}} \left(\frac{Ze^2}{r} - \frac{3}{2}\frac{Ze^2}{r_0} + \frac{1}{2}\frac{Ze^2r^2}{r_0^3}\right) r^2\, dr, \qquad (54,12)$$

$$H'_{22} = H'_{33} = H'_{44} = \frac{Z^3}{24a^3} \int_0^{r_0} e^{-\frac{Zr}{a}} \frac{Z^2r^2}{a^2} \left(\frac{Ze^2}{r} - \frac{3}{2}\frac{Ze^2}{r_0} + \frac{1}{2}\frac{Ze^2r^2}{r_0^3}\right) r^2\, dr. \qquad (54,13)$$

Пренебрегая членами порядка $r_0/a$ по сравнению с единицей, получаем

$$E_1^{(1)} = \frac{1}{20}\frac{Z^4e^2}{a}\left(\frac{r_0}{a}\right)^2, \qquad (54,14)$$

$$E_2^{(1)} = \frac{1}{1120}\frac{Z^2e^2}{a}\left(\frac{Zr_0}{a}\right)^4. \qquad (54,15)$$

Мы видим, что исходный уровень расщеплен на два подуровня. Смещение каждого из них по отношению к положению исходного уровня дается формулами (54,14) и (54,15). Величина смещения уровня $n = 2$, $l = 0$ примерно на порядок меньше, чем смещение уровня $n = 1$, $l = 0$. Смещение уровня $n = 2$, $l = 1$ еще меньше благодаря множителю $10^{-3}\left(\frac{Zr_0}{a}\right)^2$. Последнее обстоятельство обусловлено тем, что электрон в состоянии $n = 2$, $l = 1$ находится в основном вне области ядра и искажение кулоновского поля в этой области очень слабо сказывается на его состоянии.

Заметим, наконец, что рассмотренные поправки оказываются значительно более существенными для мезоатомов. Это связано с тем, что мезоны значительно тяжелее электронов и потому находятся в основном много ближе к ядру (см. § 38). Так для $\mu$-мезоатома относительное смещение уровня с $l = 0$ примерно в $4 \cdot 10^4$ раз больше, чем для обычного атома, и становится уже заметной величиной.

## § 55. Теория нестационарных возмущений

Весьма часто возмущения, действующие на квантовомеханическую систему, имеют нестационарный характер (т. е. зависят от времени). Это означает, что оператор возмущения $\hat{H}'$ является явной функцией времени $\hat{H}'(t)$. Многочисленные примеры такого рода возмущений будут приведены ниже. Мы будем предполагать, что стационарные состояния невозмущенной системы известны, т. е. известны волновые функции

$$\psi_n^{(0)}(x, t) = \psi_n^{(0)}(x)\, e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t},$$

удовлетворяющие невозмущенному уравнению

$$i\hbar \frac{\partial \psi_n^{(0)}(x, t)}{\partial t} = \hat{H}_0 \psi_n^{(0)}(x, t). \tag{55,1}$$

Мы ограничимся сначала простейшим случаем, когда состояния невозмущенной системы принадлежат дискретному спектру.

Если на систему действует малое возмущение, описываемое оператором $\hat{H}'(t)$, то волновая функция возмущенной системы $\psi$ удовлетворяет уравнению

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = (\hat{H}_0 + \hat{H}')\, \psi. \tag{55,2}$$

Метод приближенного решения этого уравнения был разработан Дираком и часто называется теорией возмущения Дирака или

методом вариации постоянных. Состояние возмущенной системы зависит от времени и ее энергия не является интегралом движения. Теперь нашей задачей является не нахождение стационарных состояний возмущенной системы, так как их не существует, а вычисление зависящей от времени волновой функции системы. Поэтому метод теории возмущений должен быть видоизменен. Решение уравнения (55,2) в методе вариации постоянных представляется в виде разложения по собственным функциям невозмущенной задачи

$$\psi(x, t) = \sum_k c_k(t)\,\psi_k^{(0)}(x, t). \tag{55,3}$$

Поскольку волновые функции $\psi_k^{(0)}(x, t)$ образуют полную систему функций, такое разложение всегда возможно. Коэффициенты разложения $c_k(t)$ являются функциями только времени, но не координат. Подставляя разложение (55,3) в уравнение (55,2), получаем

$$i\hbar \sum_k \left(\frac{dc_k}{dt}\psi_k^{(0)}(x, t) + c_k\frac{\partial\psi_k^{(0)}(x, t)}{\partial t}\right) = \sum_k c_k\left(\hat{H}_0 + \hat{H}'\right)\psi_k^{(0)}(x, t). \tag{55,4}$$

Умножим уравнение (55,4) слева на $\psi_m^{(0)*}(x, t)$ и проинтегрируем по всему пространству. Тогда, учитывая уравнение (55,1) и ортогональность волновых функций невозмущенной системы $\psi_k^{(0)}(x, t)$, имеем

$$i\hbar\frac{dc_m}{dt} = \sum_k H'_{mk}e^{i\omega_{mk}t}c_k, \tag{55,5}$$

где $H'_{mk}$ — матричный элемент оператора возмущения

$$H'_{mk} = \int \psi_m^{(0)*}(x)\,\hat{H}'\psi_k^{(0)}(x)\,dV,$$

и (55,6)

$$\omega_{mk} = \frac{1}{\hbar}(E_m - E_k).$$

Система уравнений (55,5) является точной. Она эквивалентна исходному уравнению (55,2), поскольку совокупность коэффициентов $c_k$ полностью определяет волновую функцию $\psi$. Ясно однако, что решение бесконечной системы уравнений (55,5) не является более простой задачей, чем решение исходного уравнения (55,2). Поэтому для упрощения системы уравнений (55,5) мы должны воспользоваться тем, что возмущение, действующее на систему, является малым. Предположим, что первоначально, при $t \leqslant 0$, система находилась в некотором состоянии с волновой функцией $\psi_n^{(0)}$. Тогда при $t \leqslant 0$ в разложении (55,3) все коэффициенты, кроме коэффициента с индексом $n$, равны нулю,

т. е.

$$c_k(0)=\delta_{kn}. \tag{55,7}$$

Начиная с момента времени $t=0$, система подвергается действию малого возмущения. Будем предполагать, что вследствие слабости возмущения волновая функция $\psi_n^{(0)}$ начального состояния мало меняется с течением времени. Соответственно, коэффициенты $c_k(t)$ в момент времени $t>0$ ищем в виде

$$c_k(t)=c_k^{(0)}(t)+c_k^{(1)}(t)+c_k^{(2)}(t)+\ldots, \tag{55,8}$$

где

$$c_k^{(0)}(t)=c_k(0)=\delta_{nk}.$$

Поправка $c_k^{(1)}(t)$ имеет тот же порядок малости, что и возмущение, $c_k^{(2)}(t)$ — квадратична по возмущению и т. д. Подставляя разложение (55,8) в уравнение (55,5), находим

$$i\hbar\frac{dc_m^{(1)}}{dt}=\sum_k H'_{mk}e^{i\omega_{mk}t}c_k^{(0)}=H'_{mn}e^{i\omega_{mn}t}. \tag{55,9}$$

При этом опущены все члены второго и более высокого порядка малости по возмущению. Интегрируя (55,9), получаем

$$c_m^{(1)}(t)=\frac{1}{i\hbar}\int_0^t H'_{mn}e^{i\omega_{mn}t}\,dt. \tag{55,10}$$

Аналогичным образом можно найти поправки к $c_m^{(0)}$ второго и более высокого порядка малости. Например, для поправки второго порядка $c_m^{(2)}$ без труда получается выражение

$$c_m^{(2)}=\frac{1}{i\hbar}\sum_k\int_0^t H'_{mk}e^{i\omega_{mk}t}c_k^{(1)}\,dt. \tag{55,11}$$

Если возмущение достаточно мало, то в разложении можно ограничиться малым числом членов. Таким образом, волновая функция в любой момент времени $t>0$ может быть найдена, в принципе, с желаемой степенью точности.

## § 56. Переход системы в новые состояния под влиянием возмущений

Мы выяснили, что, если на систему, находившуюся при $t\leqslant 0$ в определенном энергетическом состоянии и описывавшуюся волновой функцией $\psi_n^{(0)}$, действует возмущение $\hat{H}'(t)$, то при $t>0$ система оказывается в новом состоянии с волновой функ-

цией (55,3). Это означает, что при $t > 0$ система может быть найдена в любом из ее возможных стационарных квантовых состояний; вероятность найти систему в некотором квантовом состоянии $m$ определяется согласно общим правилам квантовой механики значением величины $|c_m|^2$. Так как в начальный момент $t = 0$ система находилась в $n$-м стационарном состоянии, то, следовательно, $|c_m(t)|^2$ определяет вероятность перехода системы из $n$-го состояния в $m$-е за время $t$, $W_{mn}(t) = |c_m(t)|^2 \equiv \equiv |c_{mn}(t)|^2$. Здесь вторым индексом мы отметили начальное состояние системы.

Итак, возмущение оказывается причиной, вызывающей переход системы из одного квантового состояния в другое. Характерной особенностью этого процесса, не имеющей аналогии в классической физике, является то, что данное возмущение вызывает переход системы из стационарного состояния с определенной энергией в новое состояние, в котором энергия не имеет какого-либо определенного значения. Часто это понимают так, что под действием возмущения система скачком переходит в одно из возможных энергетических состояний. В каком именно состоянии окажется система — дело случая. Однако такая трактовка ошибочна и противоречит физическим основам квантовой механики. В действительности конечное состояние описывается волновой функцией $\psi$ и является поэтому определенным (в квантовомеханическом смысле) состоянием.

Переход из начального в конечное состояние не совершается скачком, а разыгрывается во времени. Действительно, как мы увидим ниже, вероятность перехода определяется характером возмущения и его зависимостью от времени.

Наибольший интерес представляют переходы из дискретного в непрерывный спектр, именно такие переходы мы и будем рассматривать в дальнейшем.

Для нахождения вероятности перехода необходимо, очевидно, знать зависимость матричного элемента оператора возмущения $\hat{H}'_{\nu n}$ от времени. Здесь индексом $\nu$ мы характеризуем состояние в непрерывном спектре.

Рассмотрим прежде всего важный случай, когда оператор возмущения является гармонической функцией времени. При этом матричный элемент оператора возмущения (взятый по невозмущенным волновым функциям не зависящим от времени) также является гармонической функцией времени, т. е.

$$H'_{\nu n}(t) = H'_{\nu n}(0) \cos \omega t. \tag{56,1}$$

Будем считать, что частота $\omega$ удовлетворяет соотношению

$$\hbar\omega > E_0 - E_n^{(0)},$$

где через $E_0$ обозначено то значение энергии системы, с которого начинается непрерывный спектр. Подставляя выражение (56,1) в (55,10), находим:

$$c_{\nu n}^{(1)} = -\frac{1}{2\hbar} H'_{\nu n}(0)\left[\frac{e^{i(\omega_{\nu n}+\omega)t}-1}{\omega_{\nu n}+\omega} + \frac{e^{i(\omega_{\nu n}-\omega)t}-1}{\omega_{\nu n}-\omega}\right]. \quad (56,2)$$

Здесь вторым индексом у $c_{\nu n}^{(1)}$ мы отмечаем начальное состояние системы. Так как непрерывный спектр лежит в области бóльших энергий, чем дискретный, то $\omega_{\nu n} > 0$. Из структуры выражения (56,2) следует, что при $\omega_{\nu n} \approx \omega$ знаменатель одного из слагаемых близок к нулю. Переходы в состояния, для которых выполняется условие $\omega_{\nu n} \approx \omega$, осуществляются с наибольшей вероятностью. Именно, из дальнейшего будет видно, что вероятность перехода в такие состояния линейно растет со временем. Опуская поэтому в формуле (56,2) второе слагаемое, имеем

$$c_{\nu n}^{(1)} = -\frac{1}{2\hbar} H'_{\nu n}(0)\frac{e^{i(\omega_{\nu n}-\omega)t}-1}{\omega_{\nu n}-\omega}. \quad (56,3)$$

Соответственно для квадрата модуля $|c_{\nu n}^{(1)}|^2$ получаем

$$|c_{\nu n}^{(1)}|^2 = \frac{1}{4\hbar^2}|H'_{\nu n}(0)|^2 \frac{\sin^2 \frac{1}{2}(\omega_{\nu n}-\omega)t}{\frac{1}{4}(\omega_{\nu n}-\omega)^2} = \frac{\pi |H'_{\nu n}(0)|^2}{4\hbar^2} t f(\alpha, t), \quad (56,4)$$

где

$$\alpha = \frac{1}{2}(\omega_{\nu n}-\omega) \quad \text{и} \quad f(\alpha, t) = \frac{\sin^2 \alpha t}{\pi \alpha^2 t}.$$

Обычно на практике представляет интерес знание величины $|c_{\nu n}^{(1)}|^2$ при больших значениях времени $t$ (напоминаем, что момент включения возмущения принят за начало отсчета времени $t = 0$). Поэтому необходимо рассмотреть поведение функции $f(\alpha, t)$, когда $t \to \infty$. Легко видеть, что при $\alpha \neq 0$ и $t \to \infty$, $f(\alpha, t) \to 0$. При $\alpha = 0$ $f(0, t) = \frac{t}{\pi}$ и неограниченно возрастает с ростом $t$. Наконец, интегрируя $f(\alpha, t)$ по всем значениям $\alpha$, находим

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin^2 \alpha t}{\pi \alpha^2 t}\, d\alpha = \frac{1}{\pi}\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin^2 x}{x^2}\, dx = 1. \quad (56,5)$$

Сравнивая указанные свойства функции $f(\alpha, t)$ со свойствами $\delta$-функции, мы убеждаемся в их тождественности (см. приложение III). Таким образом, $\lim\limits_{t\to\infty} f(\alpha, t)$ есть один из возможных

конкретных видов δ-функции и мы можем написать:

$$\lim_{t\to\infty} \frac{\sin^2 \alpha t}{\pi \alpha t} = \delta(\alpha) = \delta\left(\frac{\omega_{\nu n} - \omega}{2}\right).$$

Подставляя это выражение в формулу (56,4) и пользуясь известными свойствами δ-функции (см. приложение III), получаем:

$$|c_{\nu n}^{(1)}|^2 = \frac{\pi}{4\hbar^2} |H'_{\nu n}(0)|^2 t\delta\left(\frac{\omega_{\nu n} - \omega}{2}\right) = \frac{\pi}{2\hbar} |H'_{\nu n}(0)|^2 t\delta\left(E_\nu - E_n^{(0)} - \hbar\omega\right). \tag{56,6}$$

Формулы (56,4) и (56,6) будут справедливы при условии, что вероятность перехода из данного $n$-го состояния в любое $\nu$-е состояние мала, т. е.

$$\int |c_{\nu n}^{(1)}|^2 d\nu \ll 1.$$

Лишь при этом выполняется исходное предположение о малости изменения волновой функции начального состояния. Так как вероятность перехода линейно растет со временем, то для применимости теории возмущений необходимо, чтобы время действия возмущения $t$ не было бы слишком большим. Поэтому выясним, какие заключения можно сделать о вероятности перехода за конечный интервал времени $t$. Для этого исследуем формулу (56,4), не переходя к пределу $t \to \infty$, т. е. рассмотрим поведение функции $f(\alpha, t)$. График этой функции, зависящей от времени $t$, как от параметра, представлен на рис. 16.

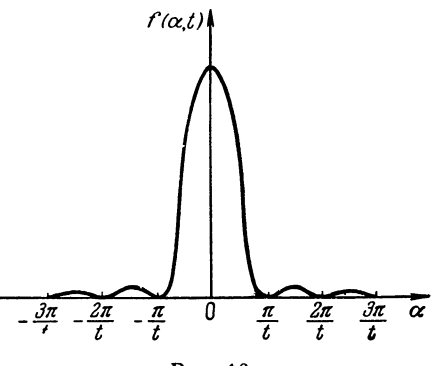


Рис. 16.

Из вида функции $f(\alpha, t)$ следует, что в основном осуществляются переходы в такие состояния, для которых величина $\alpha$ лежит в пределах главного максимума, т. е. $\Delta\alpha \sim \frac{1}{t}$. Разброс значений параметра $\alpha$ определяет разброс значений энергии конечного состояния системы

$$\Delta E_\nu \sim \hbar\,\Delta\alpha \sim \frac{\hbar}{t}. \tag{56,7}$$

Таким образом, мы приходим к выводу, что за время $t$ система под влиянием возмущения (56,1) может переходить в состояния с энергией $E_\nu = E_n^{(0)} + \hbar\omega + \Delta E_\nu$, где $\Delta E_\nu \sim \frac{\hbar}{t}$.

Неопределенность энергии конечного состояния $\Delta E_\nu \to 0$ при $t \to \infty$. Отметим, что именно такую величину неопределенности энергии конечного состояния $\Delta E_\nu \sim \frac{\hbar}{t}$ и следовало ожидать, исходя из соотношения неопределенности для времени и энергии (см. § 34).

Из требования малости неопределенности энергии конечного состояния $\Delta E_\nu$ по сравнению с энергией $\hbar\omega$ вытекает неравенство

$$t \gg \frac{1}{\omega}.$$

Следовательно, $\Delta E_\nu \ll \hbar\omega$, если время действия возмущения велико по сравнению с периодом возмущения.

Переход к $\delta$-функции в формуле (56,6) означает, что время $t$ может быть достаточно большим, так что неопределенностью энергии конечного состояния можно пренебречь, и тем не менее условие применимости теории возмущений еще выполняется.

Формула (56,6), содержащая $\delta$-функцию, имеет смысл, конечно, лишь потому, что в дальнейшем имеется в виду интегрирование по аргументу $\delta$-функции.

Заметим, что условия применимости теории возмущений нарушаются при рассмотрении переходов в дискретном спектре в так называемом резонансном случае, т. е. когда $|\omega_{kn}| \approx \omega$. При этих условиях поправки к волновой функции $\psi_n^{(0)}$ становятся большими и задача должна решаться точно [1]).

Вероятность перехода из квантового состояния с энергией $E_n^{(0)}$ в состояние непрерывного спектра в интервале $d\nu$, отнесенная к единице времени, определяется формулой

$$dW_{\nu n} = \frac{1}{t}\left| c_{\nu n}^{(1)} \right|^2 d\nu = \frac{\pi}{2\hbar}\left| H'_{\nu n}(0) \right|^2 \delta\left(E_\nu - E_n^{(0)} - \hbar\omega\right) d\nu. \quad (56,8)$$

При этом волновые функции сплошного спектра должны быть нормированы на $\delta$-функцию в $\nu$-пространстве. Формула (56,8) показывает, что под влиянием возмущения, гармонически зависящего от времени, система может совершать переходы только в состояния с энергией

$$E_\nu = E_n^{(0)} + \hbar\omega.$$

Вероятность перехода определяется квадратом матричного элемента оператора возмущения и зависит, разумеется, от выбора величин, характеризующих состояние непрерывного спектра. Часто в качестве одного из параметров, характеризующих состояние в непрерывном спектре, выбирают энергию

---

[1]) См. Л. Д. Ландау и Е. М. Лифшиц, Квантовая механика, Физматгиз, 1963, стр. 173.

частицы. Тогда, интегрируя по остальным параметрам, имеем

$$dW_{En} = \frac{\pi}{2\hbar} \left| H'_{En}(0) \right|^2 \rho(E) \, \delta\left(E - E_n^{(0)} - \hbar\omega\right) dE, \tag{56,9}$$

где $\rho(E)\,dE$ — число состояний с энергией в интервале от $E$ до $E + dE$ и введено обозначение

$$dE \int \left| H'_{\nu n} \right|^2 \frac{d\nu}{dE} = \left| H'_{En} \right|^2 \rho(E) \, dE.$$

Интегрируя по энергии, находим полную вероятность перехода в единицу времени из состояния с энергией $E_n^{(0)}$ в состояние непрерывного спектра под влиянием гармонического возмущения:

$$W = \frac{\pi}{2\hbar} \left| H'_{En}(0) \right|^2 \rho(E), \tag{56,10}$$

где

$$E = E_n^{(0)} + \hbar\omega.$$

Заметим, что если бы мы в отличие от (56,1) матричный элемент возмущения обозначили, введя экспоненциальные функции, как

$$H'_{\nu n}(t) = H'_{\nu n}(0) \left(e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}\right),$$

то числовой коэффициент в формулах (56,8) — (56,10) изменился бы, очевидно, в четыре раза. Например, формула (56,8) перепишется при этом в виде

$$dW_{\nu n} = \frac{2\pi}{\hbar} \left| H'_{\nu n}(0) \right|^2 \delta\left(E_\nu - E_n^{(0)} - \hbar\omega\right) d\nu \tag{56,8'}$$

и аналогично изменятся формулы (56,9) и (56,10).

Другим важным частным случаем является переход, вызываемый возмущением, не зависящим от времени. Выражение для вероятности перехода можно получить из формулы (56,8), полагая в ней частоту $\omega = 0$ и удваивая матричный элемент возмущения. Последнее обстоятельство связано с тем, что при переходе от (56,2) к (56,3) был опущен член, который при $\omega = 0$ совпадает с оставленным. Для вероятности перехода имеем

$$dW_{\nu\nu_0} = \frac{2\pi}{\hbar} \left| H'_{\nu\nu_0} \right|^2 \delta\left(E_\nu - E_{\nu_0}\right) d\nu. \tag{56,11}$$

Возмущение, не зависящее от времени может вызывать переходы только в состояние с той же энергией. Иными словами, оно может вызывать переходы лишь между вырожденными состояниями. Мы обозначили здесь начальное состояние индексом $\nu_0$, так как при действии постоянного возмущения основной интерес представляют переходы в непрерывном спектре. Конечно, все приведенные выше рассуждения, связанные с переходом к $\delta$-функции, сохраняются и в данном случае.

Интегрируя (56,11) по энергиям конечных состояний, можем записать вероятность перехода в другой форме:

$$dW_{\nu\nu_0} = \frac{2\pi}{\hbar} \int |H'_{\nu\nu_0}|^2 \frac{d\nu}{dE} \delta(E - E_{\nu_0})\, dE = \frac{2\pi}{\hbar} |H'_{\nu\nu_0}|^2 \frac{d\nu}{dE}. \qquad (56,12)$$

Полную вероятность перехода запишем, аналогично (56,10), в виде

$$W = \frac{2\pi}{\hbar} |H'_{E\nu_0}|^2 \rho(E), \qquad (56,13)$$

где

$$E = E_{\nu_0}.$$

Пусть, например, конечное состояние характеризуется заданием импульса частицы, так что

$$d\nu = dp_x\, dp_y\, dp_z = p^2\, dp\, d\Omega = pm\, dE\, d\Omega,$$

где $E = \frac{p^2}{2m}$ — энергия конечного состояния частицы и $d\Omega$ — элемент телесного угла.

Формула (56,12) перепишется в данном случае в виде

$$dW_{p\nu_0} = \frac{2\pi}{\hbar} |H'_{p\nu_0}|^2 mp\, d\Omega, \quad \text{где} \quad p = \sqrt{2mE_{\nu_0}}. \qquad (56,14)$$

Здесь волновые функции конечного состояния должны быть нормированы на $\delta$-функцию в импульсном пространстве.

При другом способе нормировки этих функций, например нормировке в «ящике» [см. (26,16), (26,17)] интервал конечных состояний $d\nu'$ будет иметь вид

$$d\nu' = dn_x\, dn_y\, dn_z = \frac{dp_x\, dp_y\, dp_z V}{(2\pi\hbar)^3}. \qquad (56,15)$$

Выражение для вероятности перехода (56,14) при этом, конечно, не изменится. Заметим, наконец, что выражения (56,11)—(56,14) зависят от способа нормировки волновой функции начального состояния, также принадлежащего непрерывному спектру.

Очень часто матричный элемент оператора возмущения оказывается равным нулю. В этом случае вероятность перехода обращается в нуль. Это значит, что соответствующий переход невозможен в первом приближении теории возмущений. В следующем приближении вероятность соответствующего перехода может оказаться отличной от нуля.

Найдем для этого случая вероятность перехода, вызываемого возмущением, не зависящим от времени, во втором приближении теории возмущений.

Формула (55,11) дает

$$c_\nu^{(2)} = \frac{1}{i\hbar} \sum_k \int_0^t H'_{\nu k} c_k^{(1)}(t)\, e^{i\omega_{\nu k} t}\, dt. \tag{56,16}$$

Входящая сюда сумма (по сплошному спектру — интеграл) берется по промежуточным или, как их иногда называют, виртуальным состояниям, так что сам переход можно трактовать как переход через промежуточные состояния. Необходимо подчеркнуть, что переход системы через промежуточные состояния не является реальным физическим процессом, а служит лишь для трактовки полученных формул. Поэтому, например, при переходах в виртуальные состояния энергия системы не обязана сохраняться. Подставляя в (56,16) выражение для $c_k^{(1)}$ из (56,2) ($\omega = 0$) и интегрируя, получаем

$$c_\nu^{(2)} = \frac{1}{\hbar^2} \sum_k H'_{\nu k} H'_{k\nu_0} \left[ \frac{e^{i\omega_{\nu\nu_0} t} - 1}{\omega_{k\nu_0}\omega_{\nu\nu_0}} - \frac{e^{i\omega_{\nu k} t} - 1}{\omega_{k\nu_0}\omega_{\nu k}} \right]. \tag{56,17}$$

Поскольку по предположению переходы в первом приближении теории возмущения отсутствуют, матричный элемент оператора возмущения $H'_{k\nu_0} = 0$ для переходов, происходящих с сохранением энергии $\omega_{k\nu_0} = 0$. В соответствии с этим те промежуточные состояния, для которых $\omega_{k\nu_0} = 0$, не вносят вклада в амплитуду (56,17). Для переходов, происходящих с сохранением энергии [1]) ($\omega_{\nu\nu_0} = 0$), второе слагаемое в квадратных скобках формулы (56,17) не существенно. Действительно, оно могло бы дать заметный вклад лишь при $\omega_{\nu k} = 0$. Но $\omega_{\nu\nu_0} = \omega_{\nu k} + \omega_{k\nu_0}$ и при $\omega_{\nu\nu_0} = 0$ и $\omega_{\nu k} = 0$ получаем, что и $\omega_{k\nu_0}$ обратится в нуль. Для таких переходов $H'_{k\nu_0} = 0$ и, следовательно, их можно не учитывать. Исходя из этого, мы можем переписать (56,17) как

$$c_\nu^{(2)} = -\frac{1}{\hbar} \Lambda_{\nu\nu_0} \frac{e^{i\omega_{\nu\nu_0} t} - 1}{\omega_{\nu\nu_0}}, \tag{56,18}$$

где

$$\Lambda_{\nu\nu_0} = \sum_k \frac{H'_{\nu k} H'_{k\nu_0}}{E_{\nu_0} - E_k} \tag{56,19}$$

(по сплошному спектру имеется в виду интегрирование).

---

[1]) Возможность переходов с несохранением энергии связана с предположением о внезапности включения возмущения, см. (56,1). Более подробное обсуждение этого вопроса см., например, в книге Л. Шиффа, Квантовая механика, ИЛ, 1957, стр. 234, 251.

Мы видим, что при записи в форме (56,18) выражение для амплитуды $c_\nu^{(2)}$ совпадает с (56,2) ($\omega = 0$). Поэтому полученные результаты, в частности формула для вероятности перехода (56,8), сохраняются с условием, что мы должны заменить матричный элемент $H'_{\nu\nu_0}$ на матричный элемент $\Lambda_{\nu\nu_0}$.

## § 57. Адиабатическая теория возмущений

В некоторых случаях возмущение, действующее на квантовую систему, связано с медленным, адиабатическим изменением параметров, от которых зависит состояние системы.

В случае адиабатического изменения некоторых параметров, характеризующих систему, оказывается возможным развить специальный приближенный метод расчета, именуемый адиабатической теорией возмущений. Нам придется встретиться с этим методом в дальнейшем при изучении свойств молекул и твердого тела. В таких системах имеются два сорта частиц: легкие электроны, движущиеся с большими скоростями, и тяжелые ядра, совершающие сравнительно медленное движение. Назовем электроны, входящие в систему, быстрой подсистемой, а тяжелые ядра — медленной подсистемой. Грубо говоря, характерное время, требующееся для изменения состояния быстрой подсистемы, весьма мало по сравнению с соответствующим временем для медленной подсистемы. Сущность адиабатической теории возмущений сводится к тому, что движение быстрой подсистемы рассматривается в первом приближении при заданных координатах медленной подсистемы.

Иными словами, движения быстрой и медленной подсистемы являются до известной степени независимыми.

Рассмотрим движение системы, состоящей из электронов и ядер. Уравнение Шредингера запишем в виде

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2M}\sum_i \Delta_i - \frac{\hbar^2}{2m}\sum_k \Delta_k + U(\boldsymbol{r}_k, \boldsymbol{R}_i)\right\}\psi(\boldsymbol{r}_k, \boldsymbol{R}_i) = E\psi(\boldsymbol{r}_k, \boldsymbol{R}_i). \quad (57,1)$$

Здесь $m$ и $M$ — соответственно массы электронов и ядер. Суммирование по $k$ проводится по координатам электронов, суммирование по $i$ отвечает суммированию по координатам ядер. $U$ — оператор энергии взаимодействия частиц между собой.

Предположим далее, что можно найти решение следующего уравнения Шредингера:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\sum_k \Delta_k + U(\boldsymbol{r}_k, \boldsymbol{R}_i)\right]\varphi_n(\boldsymbol{r}_k, \boldsymbol{R}_i) = E_n(\boldsymbol{R}_i)\,\varphi_n(\boldsymbol{r}_k, \boldsymbol{R}_i). \quad (57,2)$$

Уравнение (57,2) имеет следующий физический смысл. Ядра предполагаются закрепленными в точках $\boldsymbol{R}_i$. Нахождение реше-

ния уравнения (57,2) сводится к определению характера движения электронов при неподвижных ядрах, т. е. к определению электронной волновой функции $\varphi_n$ и уровней энергии электронной системы. Как видно из уравнения (57,2), уровни энергии электронной подсистемы $E_n(\boldsymbol{R}_i)$ зависят от координат ядер (тяжелой подсистемы), как от параметров.

Геометрически электронная энергия $E_n(R_i)$ образует некоторую поверхность в пространстве $R_i$. Эту поверхность называют электронным термом.

Решение уравнения (57,1) представим в виде разложения в ряд по полной системе волновых функций $\varphi_n$, т. е. напишем

$$\psi(\boldsymbol{r}_k, \boldsymbol{R}_i) = \sum_n \alpha_n(\boldsymbol{R}_i)\,\varphi_n(\boldsymbol{r}_k, \boldsymbol{R}_i). \qquad (57,3)$$

Подставляем (57,3) в (57,1), а затем умножаем уравнение (57,1) на $\varphi_m^*$ и интегрируем по координатам электронов $dV = dV_1 dV_2 \ldots$. Учитывая формулу

$$\Delta_i \alpha_n \varphi_n = \varphi_n \Delta_i \alpha_n + \alpha_n \Delta_i \varphi_n + 2\,\mathrm{grad}_i\,\varphi_n \cdot \mathrm{grad}_i\,\alpha_n,$$

находим следующее уравнение:

$$-\frac{\hbar^2}{2M}\sum_i \Delta_i \alpha_m + E_m(\boldsymbol{R}_i)\,\alpha_m = E\alpha_m + \sum_n \sum_i \left\{ \frac{\hbar^2}{2M}\alpha_n \int \varphi_m^* \Delta_i \varphi_n\, dV + \frac{\hbar^2}{M}\int \varphi_m^*\,\mathrm{grad}_i\,\varphi_n \cdot \mathrm{grad}_i\,\alpha_n\, dV \right\}. \qquad (57,4)$$

Здесь $\mathrm{grad}_i$ вычисляется по координатам ядер $\boldsymbol{R}_i$. Перепишем уравнение (57,4) в виде

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2M}\sum_i \Delta_i + E_m(\boldsymbol{R}_i)\right]\alpha_m(\boldsymbol{R}_i) = E\alpha_m(\boldsymbol{R}_i) + \hat{C}\alpha_m, \qquad (57,5)$$

где оператор $\hat{C}$ определен следующим образом:

$$\hat{C}\alpha_m = \sum_i \sum_n \left( \frac{\hbar^2}{M}\,\mathrm{grad}_i\,\alpha_n \int \varphi_m^*\,\mathrm{grad}_i\,\varphi_n\, dV + \frac{\hbar^2}{2M}\alpha_n \int \varphi_m^* \Delta_i \varphi_n\, dV \right). \qquad (57.6)$$

Оператор $\hat{C}$ носит название оператора неадиабатичности.

Если оператор $\hat{C}$ считать малым и опустить в уравнении (57,5), то уравнения для функции $\varphi_m$ и $\alpha_m$ приобретают вид

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\sum_i \Delta_k + U(\boldsymbol{r}_k, \boldsymbol{R}_i)\right]\varphi_m = E_m(\boldsymbol{R}_i)\,\varphi_m, \qquad (57,7)$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2M}\sum_i \Delta_i + E_m(\boldsymbol{R}_i)\right]\alpha_m = E\alpha_m. \qquad (57,8)$$

Таким образом, в нулевом приближении по оператору $\hat{C}$ получаем важный результат. Уравнение (57,7) представляет собой уравнение Шредингера. Координаты ядер входят в это уравнение как параметры. Функция $\varphi_m(\boldsymbol{r}_k, \boldsymbol{R}_i)$ описывает движение электронов при неподвижных ядрах. Уравнение (57,8) содержит лишь операторы, действующие на координаты ядер. Оно может рассматриваться как уравнение Шредингера для тяжелой подсистемы — ядер. При этом энергия электронной подсистемы $E_m(\boldsymbol{R}_i)$ играет роль потенциальной энергии ядер.

Полная волновая функция системы в нулевом приближении $\hat{C} = 0$ может быть представлена в виде произведения волновых функций $\alpha_m$ и $\varphi_m$, т. е. имеет такой же вид, как если бы обе подсистемы были вполне независимыми:

$$\psi = \alpha_m(\boldsymbol{R}_i)\,\varphi_m(\boldsymbol{r}_k, \boldsymbol{R}_i).$$

В описанном приближении можно говорить, что электронная подсистема адиабатически следует за движением ядер в том смысле, что при изменении положения ядер $\boldsymbol{R}_i$ электронная подсистема остается в том же квантовом состоянии $E_m$. Однако ее уровень энергии $E_m$ изменяется в соответствии с движением ядер.

В общем виде нельзя сформулировать условие малости оператора $\hat{C}$. В каждой конкретной задаче этот вопрос следует рассматривать отдельно. Примеры такого рассмотрения могут быть найдены в книгах В. Паули и М. Борна и Хуан Кунь [1]).

## § 58. Теория возмущений в интегральной форме

Теория возмущений легко может быть развита в рамках формализма Фейнмана [2]). Для этого удобно основываться на интегральном уравнении (29,5) для функции Грина $K(\boldsymbol{r}_2t_2; \boldsymbol{r}_1t_1)$, которую будем обозначать как $K\,(2,1)$

$$K(2, 1) = K_0(2, 1) - \frac{i}{\hbar}\int\limits_{-\infty}^{\infty} K_0(2, 3)\,\hat{H}'(3)\,K(3, 1)\,d^4x_3. \qquad (58,1)$$

Здесь через $K_0$ (2,1) мы обозначили функцию Грина невозмущенной задачи $\hat{H} = \hat{H}_0$, $\hat{H}' = 0$.

Пользуясь малостью возмущения, решаем уравнение (58,1) методом последовательных приближений. В нулевом приближении,

[1]) В. Паули, Общие принципы волновой механики, Гостехиздат, 1947, стр. 141; М. Борн и Хуан Кунь, Динамическая теория кристаллических решеток, ИЛ, 1958, стр. 193.

[2]) Ссылка на стр. 104. См. также С. Швебер, Г. Бете, Ф. Гофман, Мезоны и поля, т. 1, стр. 78, ИЛ, 1957.

т. е. считая $\hat{H}' = 0$, имеем:

$$K(2, 1) = K_0(2, 1). \tag{58,2}$$

Следующее приближение мы получим, если подставим в интеграл (58,1) функцию Грина $K(3,1)$ в нулевом приближении, т. е.

$$K^{(1)}(2, 1) = -\frac{i}{\hbar}\int K_0(2, 3)\,\hat{H}'(3)\,K_0(3, 1)\,d^4x_3. \tag{58,3}$$

Чтобы получить поправку к функции Грина во втором приближении, мы должны подставить в интеграл (58,1) функцию $K$ (3,1) уже с точностью до членов первого порядка малости:

$$K^{(2)}(2,1) = \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^2 \int K_0(2, 3)\,\hat{H}'(3)\,K_0(3, 4)\,\hat{H}'(4)\,K_0(4, 1)\,d^4x_3\,d^4x_4. \tag{58,4}$$

Аналогичным образом можно выписать поправку любого порядка малости. Окончательно имеем:

$$K(2, 1) = K_0(2, 1) - \frac{i}{\hbar}\int K_0(2, 3)\,\hat{H}'(3)\,K_0(3, 1)\,d^4x_3 +$$
$$+\left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \int K_0(2, 3)\,\hat{H}'(3)\,K_0(3, 4)\,\hat{H}'(4)\,K_0(4, 1)\,d^4x_3\,d^4x_4 + \ldots \tag{58,5}$$

Формулу (58,5) можно интерпретировать следующим образом: нулевой член описывает распространение невозмущенной частицы из точки 1 в точку 2. Следующий член описывает распространение свободной частицы из точки 1 в точку 3. В точке 3 действует возмущение. Затем частица, опять как свободная, распространяется из точки 3 в точку 2. Интегрирование означает, что мы суммируем вклад всех возможных точек 3. Член второго порядка малости учитывает действие возмущения уже в двух точках 3 и 4 и т. д. Вычислив из уравнения (58,5) функцию Грина $K$ в нужном приближении, мы тем самым знаем и волновую функцию в этом приближении. Удобство интегрального уравнения (58,1) в том и заключается, что оно позволяет чрезвычайно просто получить ряд теории возмущений. Примеры использования интегральной формы теории возмущений мы рассмотрим в гл. XIII.

ГЛАВА VIII

# СПИН И ТОЖДЕСТВЕННОСТЬ ЧАСТИЦ

## § 59. Спин элементарных частиц

До сих пор мы предполагали, что состояние отдельной микрочастицы задано, если известны три ее координаты или три проекции импульса или вообще три величины, образующие полный набор. Оказалось, что целый ряд экспериментальных фактов указывает на существование у ряда микрочастиц, например у электронов, протонов, нейтронов, специфической внутренней степени свободы. С этой внутренней степенью свободы, связан некоторый собственный механический момент частицы, не зависящий от ее орбитального движения. Этот механический момент частицы получил название спина (от английского слова to spin — вращаться). Существование у электрона спина было установлено еще до создания квантовой механики. Были сделаны попытки интерпретировать спин как проявление вращения частицы вокруг собственной оси (отсюда и его название). Однако такая классическая трактовка оказалась несостоятельной. Все попытки получить правильное значение отношения между механическим и магнитным моментом для системы распределенного вращающегося заряда, оказались безуспешными. Что же касается модели твердого вращающегося шарика (для которой можно получить любое значение этого отношения), то, как было пояснено в § 13 ч. II, такая модель противоречит общим положениям теории относительности. Разрешение этого противоречия было найдено в квантовой механике. Как мы увидим ниже, внутренняя степень свободы и связанный с ней спин имеют специфически квантовый характер. При переходе к классической механике $\hbar \to 0$ спин обращается в нуль. Поэтому спин не имеет никаких классических аналогов и не допускает интерпретации классического характера. Первоначально гипотеза о существовании спина была выдвинута в связи с расшифровкой спектров щелочных металлов. Позднее был установлен целый ряд фактов, позволивших однозначно установить правильность этой гипотезы.

В опытах Штерна и Герлаха непосредственно наблюдался магнитный момент, не связанный с орбитальным движением

электронов. Именно в этих опытах было установлено, что если через неоднородное магнитное поле пропускать пучок атомов водорода, находящихся в $S$-состоянии, то этот пучок расщепляется на два. Между тем в $S$-состоянии орбитальный механический момент, а следовательно и орбитальный магнитный момент, отсутствует, и пучок должен был бы проходить магнитное поле, не испытывая никакого отклонения.

Двукратное расщепление свидетельствует о двух возможных ориентациях магнитного момента электрона. По величине расщепления можно определить значение спинового магнитного момента.

Прямые опыты, проведенные Эйнштейном и де Гаазом, позволили определить отношение собственного механического и магнитного моментов.

Спин электрона (собственный механический момент) обладает общими свойствами квантовомеханического момента, которые были разобраны в § 51. Строго это было доказано с помощью аппарата теории групп. В частности, собственное значение оператора квадрата спинового момента $\hat{s}^2 = \hat{s}_x^2 + \hat{s}_y^2 + \hat{s}_z^2$ выражается формулой

$$s(s+1)\hbar^2, \tag{59,1}$$

где через $s$ мы обозначили соответствующее квантовое число — внутреннее или спиновое квантовое число частицы. Часто это квантовое число кратко именуют величиной спина частицы.

Число возможных проекций спина на произвольно ориентированную ось $z$ равно $2s+1$. Значение внутреннего числа $s$ для той или иной элементарной частицы должно быть определено на опыте. Для электрона существование и величина спина строго вытекают из релятивистской квантовой механики (теории Дирака), изложению которой будет посвящена гл. XV.

Спин наиболее часто встречающихся элементарных частиц равен: электронов $s = \frac{1}{2}$, протонов и нейтронов $s = \frac{1}{2}$, $\pi$-мезонов $s = 0$, $\mu$-мезонов $s = \frac{1}{2}$. Это означает, что возможные значения проекций спинового момента на произвольно ориентированную в пространстве ось равны, например, для электрона и других частиц со спином $1/2$

$$s_z = \pm \frac{\hbar}{2}. \tag{59,2}$$

Соответствующие проекции собственного магнитного момента электрона, как следует из опыта Штерна и Герлаха, равны по абсолютной величине магнетону Бора $\mu_0$

$$\mu_z = \mp \frac{|e|\hbar}{2mc} = \mp \mu_0. \tag{59,3}$$

Весьма существенно, что отношение собственного магнитного момента к спиновому механическому моменту равно $e/mc$

$$\mu = \frac{e}{mc} s, \tag{59,4}$$

в то время как для орбитального движения это отношение вдвое меньше (см. § 63).

В § 118 мы покажем, что такая величина собственного магнитного момента также может быть выведена теоретически из релятивистского волнового уравнения Дирака.

Спиновые свойства элементарных частиц играют огромную роль как в области микроявлений, так и в поведении макроскопических тел. Последнее обстоятельство связано с тем, что спин непосредственно определяет статистические свойства систем, построенных из квантовых частиц.

## § 60. Операторы спина

Хотя, как мы увидим ниже, существование у электрона спина и все связанные с ним свойства могут быть установлены теоретически из положений релятивистской квантовой механики, ряд свойств частиц со спином может быть получен и без привлечения релятивистской теории, на основании общих квантовомеханических соображений и сравнительно небольшого числа экспериментальных фактов. Поскольку такая полуэмпирическая теория частиц со спином имеет достаточно простой характер и позволяет получить важные результаты, мы остановимся ниже на ее изложении.

Волновая функция частицы со спином будет зависеть не только от ее трех пространственных координат, но и от четвертой координаты, характеризующей внутреннее состояние частицы. В качестве последней можно выбрать величину проекции спина на произвольно ориентированную в пространстве ось $z$. Тогда волновую функцию можно написать в виде

$$\psi = \psi(x, s_z, t). \tag{60,1}$$

В отличие от пространственных координат $x$, «спиновая координата» $s_z$ принимает лишь дискретный ряд значений. Число возможных значений $s_z$ определяется свойствами данной элементарной частицы. Как было упомянуто выше, спин большинства элементарных частиц равен половине. Поскольку проекция спина при этом может принимать только два значения, волновую функцию (60,1) удобно записать в виде столбца с двумя

строчками:

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi\left(x, \quad \frac{\hbar}{2}, t\right) \\ \psi\left(x, \ -\frac{\hbar}{2}, t\right) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}. \tag{60,2}$$

При этом $|\psi_1|^2 dV$ мы можем интерпретировать как вероятность того, что в момент времени $t$ электрон находится в элементе объема $dV$ и имеет при этом проекцию спина на ось $z$, равную $\frac{\hbar}{2}$. $|\psi_2|^2 dV$ соответственно вероятность того, что у электрона, находящегося в том же элементе объема $dV$ проекция спина на ось $z$ равна $-\frac{\hbar}{2}$. Волновая функция $\psi(x, s_z, t)$ предполагается нормированной так, что

$$\sum_{s_z} \int |\psi(x, s_z, t)|^2 dV = 1,$$

где суммирование ведется по всем возможным значениям проекции спина $s_z$. Если вероятность той или иной проекции спина не зависит от координат частицы, то волновую функцию (60,2) можно переписать в виде

$$\psi = \psi(x, t)\,\varphi, \tag{60,3}$$

где $\psi(x, t)$ — обычная (координатная) и $\varphi = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}$ — спиновая волновые функции, $c_1$ и $c_2$ — некоторые числа. $|c_1|^2$ и $|c_2|^2$ дают вероятности того, что проекция спина $s_z$ равна соответственно $+\frac{\hbar}{2}$ и $-\frac{\hbar}{2}$.

В силу условия нормировки волновой функции имеем:

$$|c_1|^2 + |c_2|^2 = 1. \tag{60,4}$$

Определив понятие спиновой волновой функции, мы должны ввести действующие на нее операторы спина. В общем виде действие оператора на спиновую функцию $\varphi = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}$ сводится к тому, что компоненты $c_1$ и $c_2$ заменяются на их некоторую линейную комбинацию

$$\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} a_{11}c_1 + a_{12}c_2 \\ a_{21}c_1 + a_{22}c_2 \end{pmatrix}. \tag{60,5}$$

В соответствии с этим спиновый оператор может быть представлен в виде матрицы

$$\hat{a} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix}. \tag{60,6}$$

Правило действия такого оператора на волновую функцию дается формулой (60,5), т. е.

$$\hat{a}\varphi = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{11}c_1 + a_{12}c_2 \\ a_{21}c_1 + a_{22}c_2 \end{pmatrix}. \tag{60,7}$$

Если разбиение волновой функции на координатную и спиновую составляющие недопустимо, то формула (60,7) перепишется в виде

$$\hat{a}\psi = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{11}\psi_1 + a_{12}\psi_2 \\ a_{21}\psi_1 + a_{22}\psi_2 \end{pmatrix}. \tag{60,8}$$

Среднее значение оператора $\hat{a}$, взятое в состоянии $\psi$, определяется согласно общей формуле (44,8):

$$\bar{a}(x, t) = \psi_1^* a_{11}\psi_1 + \psi_1^* a_{12}\psi_2 + \psi_2^* a_{21}\psi_1 + \psi_2^* a_{22}\psi_2. \tag{60,9}$$

Это равенство можно переписать в матричной форме

$$\bar{a}(x, t) = \psi^+ \hat{a}\psi, \tag{60,10}$$

где $\psi^+$ — матрица, состоящая из одной строки с элементами $\psi_1^*$ и $\psi_2^*$:

$$\psi^+ = (\psi_1^* \psi_2^*). \tag{60,11}$$

Соотношение (60,10) определяет среднее значение величины $a$ в момент времени $t$ в данной точке пространства $x$. Если это выражение усреднить по всем положениям частицы, то мы получим

$$\bar{a}(t) = \int \psi^+ \hat{a}\psi \, dV. \tag{60,12}$$

Введем теперь операторы проекций спина $\hat{s}_x$, $\hat{s}_y$, $\hat{s}_z$. В § 51 было показано, что вид этих операторов и все свойства спина могут быть получены, если за основу взяты перестановочные соотношения

$$\left.\begin{aligned} \hat{s}_x\hat{s}_y - \hat{s}_y\hat{s}_x &= i\hbar\hat{s}_z, \\ \hat{s}_y\hat{s}_z - \hat{s}_z\hat{s}_y &= i\hbar\hat{s}_x, \\ \hat{s}_z\hat{s}_x - \hat{s}_x\hat{s}_z &= i\hbar\hat{s}_y. \end{aligned}\right\} \tag{60,13}$$

То обстоятельство, что операторы проекций спина должны удовлетворять тем же перестановочным соотношениям, что и операторы проекций орбитального момента, конечно, не является случайным. Именно, в § 30 было показано, что оператор проекции орбитального момента на какую-либо ось связан с оператором бесконечно малого поворота вокруг этой оси. Перестановочные соотношения (30,3) и (30,3′) являются следствием этого обстоятельства, т. е. следствием коммутационных соотношений

между операторами бесконечно малых вращений. В следующем параграфе мы покажем, что операторы проекций спина также связаны с операторами поворота, воздействующими, однако, уже не на координатную, а на спиновую функцию. Следствием коммутационных соотношений между операторами бесконечно малых вращений вокруг осей $x$, $y$, $z$ и являются перестановочные соотношения (60,13). Приведенные соображения строго обосновываются методами теории групп[1]).

Из соотношений (60,13) следует аналогично (30,4)

$$\left.\begin{aligned} \hat{s}_x\hat{\mathbf{s}}^2 - \hat{\mathbf{s}}^2\hat{s}_x &= 0, \\ \hat{s}_y\hat{\mathbf{s}}^2 - \hat{\mathbf{s}}^2\hat{s}_y &= 0, \\ \hat{s}_z\hat{\mathbf{s}}^2 - \hat{\mathbf{s}}^2\hat{s}_z &= 0. \end{aligned}\right\} \qquad (60,14)$$

Таким образом, квадрат полного спина и одна из его проекций на произвольную ось могут быть измерены одновременно. Две проекции спина на разные оси одновременно не имеют определенных значений.

При $s=\frac{1}{2}$ матрицы спина $\hat{\mathbf{s}}^2 = \hat{s}_x^2 + \hat{s}_y^2 + \hat{s}_z^2$ и его проекции на ось $z$ в своем собственном представлении имеют вид (диагональные матричные элементы равны собственным значениям соответствующих операторов)

$$\hat{\mathbf{s}}^2 = \frac{3}{4}\hbar^2\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}; \qquad \hat{s}_z = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2}\sigma_z. \qquad (60,15)$$

Матрицы $\hat{s}_x$, $\hat{s}_y$ в этом представлении, согласно общей формуле (51,16), запишутся так:

$$\hat{s}_x = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2}\sigma_x; \qquad \hat{s}_y = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2}\sigma_y. \qquad (60,16)$$

Матрицы $\sigma_x$, $\sigma_y$, $\sigma_z$, отличающиеся от матриц $\hat{s}_x$, $\hat{s}_y$, $\hat{s}_z$ постоянным множителем $\frac{\hbar}{2}$, носят название матриц Паули. Они удовлетворяют следующим перестановочным соотношениям:

$$\left.\begin{aligned} \sigma_x\sigma_y &= -\sigma_y\sigma_x = i\sigma_z, \\ \sigma_y\sigma_z &= -\sigma_z\sigma_y = i\sigma_x, \\ \sigma_z\sigma_x &= -\sigma_x\sigma_z = i\sigma_y, \end{aligned}\right\} \qquad (60,17)$$

$$\sigma_x^2 = \sigma_y^2 = \sigma_z^2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = 1.$$

---

[1]) См. В. Паули, Общие принципы волновой механики, Гостехиздат, 1947, стр. 165.

Произвольная матрица второго ранга может быть выражена через матрицы $\sigma_x$, $\sigma_y$, $\sigma_z$ и единичную матрицу.

Наряду со сходством между орбитальным и спиновым моментами между ними существует принципиальное различие. В то время как орбитальный момент характеризуется квантовым числом $l$, могущим принимать любые целочисленные значения независимо от природы частицы, спиновое число $s$ принимает ограниченный ряд значений, например $s = {}^1/_2$ для большинства элементарных частиц. При этом каждый вид элементарных частиц имеет свое характерное значение спина. Если совершить переход к классической механике, положив $\hbar \to 0$, то, как это было выяснено в § 41, следует одновременно перейти к пределу больших квантовых чисел. Поэтому, хотя по формуле (30,15) $l^2 = \hbar^2 l(l+1)$, из условия $\hbar \to 0$ еще не следует, что $l = 0$, так как одновременно с $\hbar \to 0$ следует положить $l \to \infty$. В случае спинового момента дело обстоит иначе. Поскольку $s$ принимает лишь ограниченный ряд значений, переход к классической механике всегда приводит к значению спина $s = 0$. Мы видим, что в классической механике нет никакой величины, которая служила бы классическим аналогом спина. Спин — чисто квантовое понятие, характеризующее специфические свойства микрочастиц.

## § 61. Собственные функции операторов проекций спина частицы. Матрица поворота

Найдем собственные функции и собственные значения операторов $\hat{s}_x$, $\hat{s}_y$, $\hat{s}_z$. Уравнение для собственных функций $\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}$ и собственных значений $s_x$ оператора $\hat{s}_x$ имеет вид

$$\hat{s}_x \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = s_x \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}.$$

Учитывая (60,16) и производя умножение, получаем

$$\begin{pmatrix} \frac{\hbar}{2} c_2 \\ \frac{\hbar}{2} c_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} s_x c_1 \\ s_x c_2 \end{pmatrix}.$$

Раскрываем это равенство:

$$\left.\begin{aligned} \frac{\hbar}{2} c_2 &= s_x c_1, \\ \frac{\hbar}{2} c_1 &= s_x c_2, \end{aligned}\right\} \qquad (61,1)$$

откуда, перемножая, находим $s_x$:

$$s_x = \pm \frac{\hbar}{2}.$$

Собственные значения оператора проекции спина, как и следовало ожидать, оказались равными $\pm\frac{\hbar}{2}$. Определим вид собственных функций, отвечающих этим собственным значениям.

При $s_x = +\frac{\hbar}{2}$ из (61,1) имеем:

$$c_1 = c_2.$$

Учитывая условие нормировки (60,4), окончательно получаем

$$\varphi_{s_x=+\hbar/2} = \frac{1}{\sqrt{2}} c^{i\alpha_1} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \tag{61,2}$$

где $\alpha_1$ — произвольная фаза.

При $s_x = -\frac{\hbar}{2}$ соответственно

$$c_1 = -c_2$$

и спиновая волновая функция запишется в виде

$$\varphi_{s_x=-\hbar/2} = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\alpha_2} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}. \tag{61,3}$$

Собственные значения операторов $\hat{s}_y$ и $\hat{s}_z$, естественно, также равны $\pm\frac{\hbar}{2}$. Аналогичным образом находим и их собственные функции

$$\varphi_{s_y=\hbar/2} = \frac{1}{\sqrt{2}} c^{i\alpha_3} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix}; \quad \varphi_{s_y=-\hbar/2} = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\alpha_4} \begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix}, \tag{61,4}$$

$$\varphi_{s_z=\hbar/2} \equiv \varphi_{1/2} = e^{i\alpha_5} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}; \quad \varphi_{s_z=-\hbar/2} \equiv \varphi_{-1/2} = c^{i\alpha_6} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \tag{61,5}$$

Произвольные фазовые множители $\alpha_i$ можно положить, в частности, равными нулю.

Произведем теперь некоторое вращение системы координат $x, y, z \to x', y', z'$. Спиновые волновые функции при этом также изменяются $\varphi \to \varphi'$. Действительно, переход от системы координат $x, y, z$ к системе $x', y', z'$ означает соответствующий переход от одного представления к другому. Такой переход, как мы знаем (см. § 46), осуществляется с помощью некоторой унитарной матрицы $\hat{T}$, так что $\varphi' = \hat{T}\varphi$. В данном случае унитарную матрицу $\hat{T}$ естественно назвать матрицей поворота. Определим эту матрицу. Рассмотрим сначала вращение лишь вокруг оси $z$

на некоторый угол $\eta$. Согласно (46,15), операторы проекций спина в новом представлении имеют вид

$$\left.\begin{aligned} \hat{s}'_x &= \hat{T}_z \hat{s}_x \hat{T}_z^{-1}, \\ \hat{s}'_y &= \hat{T}_z \hat{s}_y \hat{T}_z^{-1}, \\ \hat{s}'_z &= \hat{T}_z \hat{s}_z T_z^{-1}. \end{aligned}\right\} \qquad (61,6)$$

Здесь $\hat{s}'_x$, $\hat{s}'_y$, $\hat{s}'_z$ — операторы проекций спина на старые оси координат $x$, $y$, $z$, взятые, однако, в новом представлении, связанном с системой $x'$, $y'$, $z'$. Поскольку мы рассматриваем вращение вокруг оси $z$, оси $z$ и $z'$ совпадают и, следовательно, совпадают операторы проекций спина на эти оси в обоих представлениях (выражаются диагональной матрицей (60,15)). Однако условия того, что оператор проекции спина на ось $z$ выбран в виде диагональной матрицы (60,15), еще не достаточно для определения операторов проекций спина на другие направления. Оператор проекции спина на любое направление будет известен, если мы зададим в виде матриц еще операторы $\hat{s}_x$ и $\hat{s}_y$ в некоторой системе координат $x$, $y$, $z$, с которой мы связываем представление. Мы можем, в частности, выбрать представление, связанное с системой $x'$, $y'$, $z'$. В этом представлении (мы его отмечаем штрихами) операторы проекций спина $\hat{s}'_{x'}$, $\hat{s}'_{y'}$, $\hat{s}'_{z'}$ на оси $x'$, $y'$, $z'$ имеют вид (60,16), (60,15).

Ввиду того, что операторы $\hat{s}_x$, $\hat{s}_y$, $\hat{s}_z$ отвечают проекциям спинового момента, они должны преобразовываться при вращениях системы координат как проекции момента количества движения, т. е. как компоненты аксиального вектора. Так как мы рассматриваем вращение на угол $\eta$ вокруг оси $z$, то операторы проекций спина на штрихованные и нештрихованные оси координат связаны между собой соотношениями

$$\left.\begin{aligned} \hat{s}_x &= \hat{s}_{x'} \cos\eta - \hat{s}_{y'} \sin\eta, \\ \hat{s}_y &= \hat{s}_{x'} \sin\eta + \hat{s}_{y'} \cos\eta, \\ \hat{s}_z &= \hat{s}_{z'}. \end{aligned}\right\} \qquad (61,7)$$

Равенства (61,7) имеют место в любом представлении. В частности, в представлении, связанном с повернутой системой координат, имеем

$$\left.\begin{aligned} \hat{s}'_x &= \hat{s}'_{x'} \cos\eta - \hat{s}'_{y'} \sin\eta = \hat{s}_x \cos\eta - \hat{s}_y \sin\eta, \\ \hat{s}'_y &= \hat{s}'_{x'} \sin\eta + \hat{s}'_{y'} \cos\eta = \hat{s}_x \sin\eta + \hat{s}_y \cos\eta, \\ \hat{s}'_z &= \hat{s}'_{z'} = \hat{s}_z. \end{aligned}\right\} \qquad (61,8)$$

Действительно, обе системы координат, штрихованная и нештрихованная, совершенно равноправны. Операторы проекций спина на оси штрихованной системы координат, взятые в пред-

ставлении, связанном именно с этой повернутой системой координат, имеют, как мы уже отмечали, обычный вид (60,15), (60,16), т. е. совпадают с операторами проекций спина на оси нештрихованной системы координат, взятыми в представлении, связанном с нештрихованной системой координат:

$$\hat{s}'_{x'} = \hat{s}_x; \quad \hat{s}'_{y'} = \hat{s}_y; \quad \hat{s}'_{z'} = \hat{s}_z.$$

Рассматривая совместно равенства (61,6) и (61,8), мы и найдем матрицу $\hat{T}_z$. Прежде всего из (61,6) и (61,8) следует, что $\hat{s}_z = \hat{T}_z \hat{s}_z \hat{T}_z^{-1}$, т. е. матрица $\hat{T}_z$ коммутирует с $\hat{s}_z$. Поскольку матрица $\hat{s}_z$ диагональна, диагональна и матрица $\hat{T}_z$ (см. § 47). Следовательно, матрица $\hat{T}_z$ имеет вид

$$\hat{T}_z = \begin{pmatrix} a_1 & 0 \\ 0 & a_2 \end{pmatrix}.$$

Условие унитарности матрицы $\hat{T}_z$, $\hat{T}_z \hat{T}_z^+ = \hat{T}_z^+ \hat{T}_z = 1$ приводит к равенству

$$\begin{pmatrix} |a_1|^2 & 0 \\ 0 & |a_2|^2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

или $|a_1|^2 = 1$ и $|a_2|^2 = 1$.

Следовательно, матрица $\hat{T}_z$ имеет вид

$$\hat{T}_z = \begin{pmatrix} e^{i\alpha_1} & 0 \\ 0 & e^{i\alpha_2} \end{pmatrix}, \tag{61,9}$$

где $\alpha_1$ и $\alpha_2$ — вещественны.

Уравнение (61,6) перепишем в виде

$$\hat{s}'_x \hat{T}_z = \hat{T}_z \hat{s}_x, \qquad \hat{s}'_y \hat{T}_z = \hat{T}_z \hat{s}_y.$$

Подставляя в эти выражения значения $\hat{s}'_x$ и $\hat{s}'_y$ из (61,8) и приравнивая соответствующие матричные элементы, найдем, что равенства удовлетворяются при условии $\alpha_1 - \alpha_2 = \eta$.

Таким образом, для двух фаз $\alpha_1$ и $\alpha_2$ мы получили только одно условие, их связывающее. Это обстоятельство не является случайным. Дело в том, что матрица $\hat{T}_z$ может содержать произвольный общий фазовый множитель, который не скажется ни на каких результатах, так как сами волновые функции определены с точностью до произвольного фазового множителя. В соответствии с этим представим матрицу $\hat{T}_z$ в виде

$$\hat{T}_z(\eta) = \begin{pmatrix} e^{i\eta/2} & 0 \\ 0 & e^{-i\eta/2} \end{pmatrix}. \tag{61,10}$$

Матрицу $\hat{T}_z$ можем также выразить через матрицу $\sigma_z$:

$$\hat{T}_z(\eta) = \cos\frac{\eta}{2} + i\sigma_z \sin\frac{\eta}{2}, \tag{61,11}$$

или в несколько иной форме:

$$\hat{T}_z = e^{\frac{i}{2}\eta\sigma_z}. \tag{61,12}$$

Последнее выражение следует понимать как

$$\hat{T}_z = 1 + \left(\frac{i}{2}\eta\sigma_z\right) + \frac{1}{2}\left(\frac{i}{2}\eta\sigma_z\right)^2 + \ldots + \frac{1}{n!}\left(\frac{i}{2}\eta\sigma_z\right)^n + \ldots$$

Так как $\sigma_z^2 = 1$, $\sigma_z^3 = \sigma_z$ и т. д., ряд легко свертывается, и мы опять приходим к формуле (61,11). Если угол поворота мал, то матрица поворота (61,12) имеет вид

$$\hat{T}_z = 1 + i\frac{\eta}{\hbar}\hat{s}_z, \tag{61,13}$$

где мы ввели вместо $\sigma_z$ матрицу $\hat{s}_z = \frac{\hbar}{2}\sigma_z$. Мы получили выражение, которое имеет ту же структуру, что и полученный в § 30 оператор поворота, действующий на функцию, зависящую от пространственных координат.

Соотношение типа (61,11) справедливо, конечно, и для поворота вокруг любой другой оси, поскольку все направления равноправны. Так, например, выпишем матрицу поворота $\hat{T}_x$ вокруг оси $x$ на некоторый угол $\vartheta$:

$$\hat{T}_x(\vartheta) = \cos\frac{\vartheta}{2} + i\sigma_x \sin\frac{\vartheta}{2}. \tag{61,13'}$$

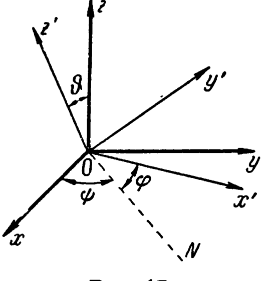


Рис. 17.

Произвольный поворот одной координатной системы относительно другой можно охарактеризовать тремя углами Эйлера $\vartheta$, $\varphi$, $\psi$ (рис. 17). Угол $\psi$ — угол между осью $Ox$ и прямой $ON$ пересечения плоскостей $xOy$ и $x'Oy'$, $\vartheta$ — угол между осями $Oz$ и $Oz'$ и, наконец, $\varphi$ — угол между $ON$ и осью $Ox'$. Полное вращение можно разбить на три последовательных вращения: I — вокруг оси $z$ на угол $\psi$; II — вокруг нового положения оси $x(OV)$ на угол $\vartheta$ и III — вокруг нового положения оси $Oz$ на угол $\varphi$. Матрица поворота $T$ будет равна произведению трех матриц $\hat{T} = \hat{T}_z(\varphi)\hat{T}_x(\vartheta)\hat{T}_z(\psi)$.

Пользуясь (61,10) и (61,13′), находим, перемножая матрицы:

$$\hat{T}=\begin{pmatrix} e^{\frac{i}{2}(\psi+\varphi)}\cos\frac{\vartheta}{2} & ie^{-\frac{i}{2}(\psi-\varphi)}\sin\frac{\vartheta}{2} \\ ie^{\frac{i}{2}(\psi-\varphi)}\sin\frac{\vartheta}{2} & e^{-\frac{i}{2}(\psi+\varphi)}\cos\frac{\vartheta}{2} \end{pmatrix}. \qquad (61,14)$$

Впервые эта матрица была получена Паули. Двухкомпонентная волновая функция $\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}$, преобразующаяся при вращении системы координат по закону $\begin{pmatrix} c_1' \\ c_2' \end{pmatrix}=\hat{T}\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}$, называется спинором.

Введенные нами компоненты спинора обычно обозначают как

$$\varphi=\begin{pmatrix} \varphi^1 \\ \varphi^2 \end{pmatrix}.$$

Заметим, что для любого заданного спинора $\varphi=\begin{pmatrix} \varphi^1 \\ \varphi^2 \end{pmatrix}$ всегда можно найти такую матрицу $\hat{T}(\varphi, \vartheta, \psi)$, что $\varphi^{1'}=1$, $\varphi^{2'}=0$, т. е. всегда можно определить направление, характеризуемое углами $(\varphi, \vartheta, \psi)$, по которому ориентирован спин частицы.

Матрицу $\hat{T}$ перепишем в виде

$$\hat{T}=\begin{pmatrix} \alpha & \beta \\ \gamma & \delta \end{pmatrix},$$

так что

$$\left.\begin{aligned} \varphi^{1'}&=\alpha\varphi^1+\beta\varphi^2, \\ \varphi^{2'}&=\gamma\varphi^1+\delta\varphi^2, \end{aligned}\right\} \qquad (61,15)$$

где, как это следует из (61,14),

$$\left.\begin{aligned} \alpha&=\delta^*, \\ \beta&=-\gamma^*, \\ \alpha\delta-\beta\gamma&=1. \end{aligned}\right\} \qquad (61,16)$$

Преобразование (61,15) обычно называется бинарным преобразованием.

Бинарное преобразование оставляет инвариантными некоторые билинейные формы. Действительно, используя (61,15), (61,16), легко получим для двух произвольных спиноров $\varphi$ и $\eta$:

$$\left.\begin{aligned} &\varphi^{1'}\eta^{2'}-\varphi^{2'}\eta^{1'}=(\alpha\delta-\beta\gamma)(\varphi^1\eta^2-\varphi^2\eta^1)=\varphi^1\eta^2-\varphi^2\eta^1, \\ &\varphi^{1*}\varphi^1+\varphi^{2*}\varphi^2=\text{const}. \end{aligned}\right\} \qquad (61,17)$$

Последнее соотношение выражает сохранение нормировки при вращении системы координат.

С помощью компонент спиноров $\eta^1$, $\eta^2$ и $\zeta^1$, $\zeta^2$ можно построить величины, преобразующиеся при вращении системы координат, как компоненты вектора, т. е. по закону

$$a'_i = \sum_{k=1}^{3} \alpha_{ik} a_k,$$

где $\alpha_{ik}$ — косинусы углов между старыми и новыми осями координат. Непосредственной проверкой, используя (61,14), (61,15), можно убедиться, что компоненты вектора определяются соотношениями

$$\left.\begin{aligned} a_z &= (\eta^1\zeta^2 + \eta^2\zeta^1), \\ a_x &= (\eta^2\zeta^2 - \eta^1\zeta^1), \\ a_y &= -i(\eta^1\zeta^1 + \eta^2\zeta^2). \end{aligned}\right\} \qquad (61,18)$$

Соответственно для квадрата вектора имеем

$$a^2 = a_x^2 + a_y^2 + a_z^2 = (\eta^1\zeta^2 - \eta^2\zeta^1)^2. \qquad (61,19)$$

Мы получили, как и следовало ожидать, скалярную величину.

Компоненты тензора произвольного ранга $B_{ikl\ldots}$ можно определить как произведение $a_i b_k c_l \ldots$ соответствующих компонент векторов. С помощью формул (61,18) мы можем сопоставить компонентам $B_{ikl\ldots}$ произведения компонент спиноров.

Определим, наконец, закон преобразования спинора при инверсии системы координат, т. е. при преобразовании $x \to -x$, $y \to -y$, $z \to -z$.

Оператор инверсии обозначим через $\hat{I}$, так что

$$\varphi' = \hat{I}\varphi. \qquad (61,20)$$

Преобразование (61,20) опять можно рассматривать как переход к другому представлению. Соответствующее преобразование операторов $\hat{s}_x$, $\hat{s}_y$, $\hat{s}_z$ аналогично (61,6). С другой стороны, операторы $\hat{s}_x$, $\hat{s}_y$, $\hat{s}_z$ мы можем рассматривать как компоненты аксиального вектора (как и компоненты орбитального момента). Следовательно, эти операторы не должны изменять знак при отражении. Основываясь на этом, получаем аналогично формуле (61,6):

$$\left.\begin{aligned} \hat{s}_x &= \hat{I}\hat{s}_x\hat{I}^{-1}, \\ \hat{s}_y &= \hat{I}\hat{s}_y\hat{I}^{-1}, \\ \hat{s}_z &= \hat{I}\hat{s}_z\hat{I}^{-1}. \end{aligned}\right\} \qquad (61,21)$$

При двукратном применении матрицы $\hat{I}$ мы возвращаемся к исходному состоянию и, следовательно, должны получить спинор $\varphi$. Кроме того, мы можем получить спинор $-\varphi$, если будем рассматривать двукратное отражение как поворот на угол $2\pi$, а при таком повороте, как видно из формул (61,10), (61,13′), спинор меняет знак. Соответственно имеем:

$$\hat{I}^2 = \pm\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}. \tag{61,22}$$

Мы видим, следовательно, что матрица $\hat{I}$ должна коммутировать с матрицами $\hat{s}_x$, $\hat{s}_y$, $\hat{s}_z$, а квадрат ее должен давать единичную матрицу, умноженную на $\pm 1$. Указанные требования будут выполнены при условии, что

$$\hat{I} = \pm\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad \text{или} \quad \hat{I} = \pm i\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}. \tag{61,23}$$

Следовательно, при отражении спинор может преобразоваться следующим образом:

$$\varphi' = \pm\,\varphi \tag{61,24}$$

или

$$\varphi' = \pm\, i\varphi. \tag{61,25}$$

Если закон преобразования определяется верхним знаком в формулах (61,24) и (61,25), то $\varphi$ иногда называют полярным спинором, если нижним, то — псевдоспинором.

## § 62. Полный момент количества движения

Полный момент количества движения частицы складывается из орбитального и спинового моментов. По правилам сложения векторных операторов имеем для оператора полного момента $\hat{\boldsymbol{j}}$:

$$\hat{\boldsymbol{j}} = \hat{\boldsymbol{l}} + \hat{\boldsymbol{s}}. \tag{62,1}$$

Операторы орбитального и спинового моментов действуют на разные переменные. Первый — на пространственные переменные, второй — лишь на спиновые. Поэтому оба эти оператора коммутируют между собой. Из этого непосредственно вытекает, что проекции оператора полного момента удовлетворяют тем же правилам коммутации, что и проекции орбитального и спинового моментов. Эти перестановочные соотношения следуют и из связи оператора полного момента с оператором поворота.

(см. ниже):

$$\left.\begin{aligned}\hat{j}_x\hat{j}_y-\hat{j}_y\hat{j}_x&=i\hbar\hat{j}_z,\\ \hat{j}_y\hat{j}_z-\hat{j}_z\hat{j}_y&=i\hbar\hat{j}_x,\\ \hat{j}_z\hat{j}_x-\hat{j}_x\hat{j}_z&=i\hbar\hat{j}_y,\end{aligned}\right\} \tag{62,2}$$

а также

$$\left.\begin{aligned}\hat{j}_x\hat{j}^2-\hat{j}^2\hat{j}_x&=0,\\ \hat{j}_y\hat{j}^2-\hat{j}^2\hat{j}_y&=0,\\ \hat{j}_z\hat{j}^2-\hat{j}^2\hat{j}_z&=0.\end{aligned}\right\} \tag{62,3}$$

Из соотношений (62,2) следует (см. § 51), что собственные значения оператора $\hat{j}^2$ имеют вид

$$j^2=\hbar^2 j(j+1). \tag{62,4}$$

Значение квантового числа $j$ определяет величину полного момента количества движения. По правилам сложения моментов в квантовой механике (52,1) следует, что число $j$ при заданных $l$ и $s$ пробегает ряд значений

$$j=|l-s|,\quad |l-s|+1,\ \dots,\ l+s-1,\quad l+s.$$

Квантовое число $j$ принимает целые значения, если спин имеет целочисленное значение, и полуцелые, если спин полуцелый.

Покажем, что в случае частицы, движущейся в свободном пространстве или в центрально-симметричном поле, интегралом движения является именно полный момент количества движения. Для доказательства введем оператор поворота $\hat{R}$, учитывающий изменение как спиновых, так и пространственных координат волновой функции. Рассмотрим поворот системы координат вокруг оси $z$ на некоторый малый угол $\delta\varphi$. Исходя из результатов, полученных в §§ 30 и 61, легко определить изменение полной волновой функции при таком вращении:

$$\psi'=\hat{R}_z\psi=\hat{T}_z\hat{W}_z\psi=\left[1+\frac{i}{\hbar}\,\delta\varphi\,(\hat{s}_z+\hat{l}_z)\right]\psi=\left(1+\frac{i}{\hbar}\,\delta\varphi\,\hat{j}_z\right)\psi.$$

Аналогичное соотношение имеет место, конечно, и для поворота вокруг любой другой оси. Мы видим, следовательно, что с оператором поворота связан именно оператор полного момента количества движения. Но операция поворота в силу изотропии пространства не должна изменять гамильтониана замкнутой системы (или системы в центрально-симметричном поле). Математически это проявляется в том, что оператор $\hat{R}_z$, а следовательно, и оператор $\hat{j}_z$ будут коммутировать с гамильтонианом частицы $\hat{H}$.

Таким образом, закон сохранения полного момента количества движения есть следствие изотропии пространства. Для спинового и орбитального моментов порознь законы сохранения имеют место лишь приближенно при пренебрежении спин-орбитальным взаимодействием.

Если мы имеем систему невзаимодействующих частиц, то полный момент количества движения всей системы $\hat{J}$ складывается из моментов отдельных частиц $\hat{j}_k$ по правилам сложения моментов в квантовой механике

$$\hat{J} = \sum \hat{j}_k. \tag{62,5}$$

Можно ввести также оператор орбитального момента количества движения $\hat{L}$:

$$\hat{L} = \sum_k \hat{l}_k \tag{62,6}$$

и оператор полного спина системы $\hat{S}$:

$$\hat{S} = \sum_k \hat{s}_k. \tag{62,7}$$

Так как $\hat{j}_k = \hat{l}_k + \hat{s}_k$, то, очевидно, имеем

$$\hat{J} = \hat{L} + \hat{S}. \tag{62,8}$$

Операторы, относящиеся к разным частицам, коммутируют между собой, так как они действуют на разные переменные. Поэтому для операторов проекций полных моментов $\hat{J}$, $\hat{L}$, $\hat{S}$ имеют место такие же коммутационные соотношения, как и для операторов, относящихся к отдельным частицам. Например, для операторов проекций $\hat{J}_x$, $\hat{J}_y$ полного момента имеем

$$\hat{J}_x\hat{J}_y - \hat{J}_y\hat{J}_x = \sum_{k,i} (\hat{j}_{kx}\hat{j}_{iy} - \hat{j}_{iy}\hat{j}_{kx}) =$$
$$= \sum_k (\hat{j}_{kx}\hat{j}_{ky} - \hat{j}_{ky}\hat{j}_{kx}) = i\hbar \sum_k \hat{j}_{kz} = i\hbar\hat{J}_z.$$

Аналогичный результат имеет место для остальных проекций оператора $\hat{J}$, а также для операторов $\hat{L}$ и $\hat{S}$.

При заданных собственных значениях операторов, относящихся к отдельным частицам, собственные значения операторов, $\hat{J}^2$, $\hat{L}^2$, $\hat{S}^2$ и операторов проекций моментов определяются по правилу сложения моментов в квантовой механике. Сохраняющейся величиной для системы частиц является полный момент $J$.

## § 63. Уравнение Паули. Вектор плотности потока вероятности

В главе, посвященной релятивистской квантовой механике, будет установлено точное релятивистское уравнение квантовой механики и показано, что уравнение Шредингера получается из него при предельном переходе $v/c \to 0$.

При этом оказывается, что если учитывать члены различного порядка малости, то в гамильтониане будут возникать дополнительные слагаемые, описывающие ряд важных свойств квантовых систем.

В частности, как самый факт существования спина, так и существования у электрона магнитного момента, вытекает из релятивистского волнового уравнения при разложении по степеням $v/c$ и сохранения членов первого порядка малости.

Откладывая доказательство этого утверждения до § 118, введем оператор собственного магнитного момента, в соответствии с (59,4), соотношением

$$\hat{\boldsymbol{\mu}} = \alpha\hat{\boldsymbol{s}} = \frac{e}{mc}\hat{\boldsymbol{s}}. \tag{63,1}$$

Тогда оператор Гамильтона для электрона в электромагнитном поле приобретает вид

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\left(\hat{\boldsymbol{p}} - \frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)^2 + U(\boldsymbol{r}) - \hat{\boldsymbol{\mu}}\boldsymbol{\mathcal{H}} = \frac{1}{2m}\left(\hat{\boldsymbol{p}} - \frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)^2 + U(\boldsymbol{r}) - \frac{e}{mc}(\hat{\boldsymbol{s}}\boldsymbol{\mathcal{H}}), \tag{63,2}$$

где $\boldsymbol{\mathcal{H}}$ — напряженность магнитного поля. Поскольку гамильтониан зависит от спина, волновая функция электрона также зависит от спиновой переменной, т. е. $\psi = \psi(x, y, z, t, s_z)$. Уравнение для волновой функции $\psi(x, y, z, t, s_z)$ в магнитном поле, впервые введенное Паули и носящее его имя, имеет вид

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \frac{1}{2m}\left(\hat{\boldsymbol{p}} - \frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)^2\psi - \frac{e}{mc}(\hat{\boldsymbol{s}}\boldsymbol{\mathcal{H}})\psi + U\psi. \tag{63,3}$$

Найдем вектор плотности потока вероятности. Для этого выпишем уравнение для функции $\psi^+$

$$-i\hbar\frac{\partial\psi^+}{\partial t} = \frac{1}{2m}\left(\hat{\boldsymbol{p}} - \frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)^2\psi^+ - \frac{e}{mc}[(\hat{\boldsymbol{s}}\boldsymbol{\mathcal{H}})\psi]^+ + U\psi^+. \tag{63,3$'$}$$

Умножим (63,3) на $\psi^+$ слева, а (63,3′) на $\psi$ справа и вычтем одно из другого.

Учитывая, что $\hat{\boldsymbol{p}}\boldsymbol{A} - \boldsymbol{A}\hat{\boldsymbol{p}} = \frac{\hbar}{i}\nabla\boldsymbol{A}$, после простых преобразований получаем

$$\frac{\partial(\psi^+\psi)}{\partial t} = -\frac{i\hbar}{2m}\nabla[(\nabla\psi^+)\psi - \psi^+\nabla\psi] + \frac{e}{mc}\nabla(\boldsymbol{A}\psi^+\psi) + \frac{ie}{mc\hbar}[\psi^+(\hat{\boldsymbol{s}}\boldsymbol{\mathcal{H}})\psi - ((\hat{\boldsymbol{s}}\boldsymbol{\mathcal{H}})\psi)^+\psi]. \tag{63,4}$$

Из правил действия с матрицами (45,20) следует, что

$$((\hat{s}\mathcal{H})\psi)^+ = \psi^+(\hat{s}^+\mathcal{H}) \tag{63,5}$$

и, кроме того, $\hat{s}^+ = \hat{s}$ в силу эрмитовости оператора спина. Таким образом, слагаемое в квадратных скобках обращается в нуль и мы получаем выражение для вектора плотности потока вероятности. (Следует иметь в виду, что в него входят двухкомпонентные волновые функции.) Умножая его на заряд $e$, получаем вектор плотности электрического тока

$$\boldsymbol{j} = \frac{i\hbar e}{2m}((\nabla\psi^+)\psi - \psi^+\dot{\nabla}\psi) - \frac{e^2}{mc}\boldsymbol{A}\psi^+\psi. \tag{63,6}$$

Выражение (63,4) определяет вектор плотности потока вероятности $\boldsymbol{j}$ с точностью до $\operatorname{rot}\boldsymbol{B}$, где $\boldsymbol{B}$ — произвольный вектор. Можно показать, что $\boldsymbol{B} = \frac{e}{m}\psi^+\hat{s}\psi$, так что полное выражение для плотности электрического тока будет иметь вид [1])

$$\boldsymbol{j}_n = -\frac{i\hbar e}{2m}\left(\psi^+\nabla\psi - (\nabla\psi^+)\psi\right) - \frac{e^2}{mc}\boldsymbol{A}(\psi^+\psi) + \frac{e}{m}\operatorname{rot}(\psi^+\hat{s}\psi). \tag{63,7}$$

Рассмотрим случай, когда частица движется в постоянном магнитном поле $\mathcal{H}$, а электрическое поле отсутствует. Векторный потенциал $\boldsymbol{A}$ при этом можно выбрать в виде

$$\boldsymbol{A} = \frac{1}{2}(\mathcal{H}\times\boldsymbol{r}). \tag{63,8}$$

Преобразуем уравнение Паули (63,3), учитывая, что для вектора-потенциала (63,8) справедливо соотношение

$$\hat{p}\boldsymbol{A} = \boldsymbol{A}\hat{p}.$$

Кроме того, предполагаем, что магнитное поле $\mathcal{H}$ достаточно слабо и в соответствии с этим опускаем в уравнении Паули члены, квадратичные по $\mathcal{H}$. Тогда имеем:

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \frac{\hat{p}^2}{2m}\psi - \frac{e}{2mc}(\mathcal{H}\times\boldsymbol{r})\hat{p}\psi - \frac{e}{mc}(\hat{s}\mathcal{H})\psi.$$

Так как

$$(\mathcal{H}\times\boldsymbol{r})\hat{p} = \mathcal{H}(\boldsymbol{r}\times\hat{p}) = \mathcal{H}\hat{l},$$

где $\hat{l}$ — орбитальный момент количества движения, то

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \frac{\hat{p}^2}{2m}\psi - (\hat{\mu}_l\mathcal{H})\psi - (\hat{\mu}_s\mathcal{H})\psi. \tag{63,9}$$

---

[1]) См. Л. Д. Ландау и Е. М. Лифшиц, Квантовая механика, Физматгиз, 1963, стр. 506.

Оператор $\hat{\mu}_l$,

$$\hat{\mu}_l = \frac{e}{2mc}\hat{l},$$

естественно назвать оператором орбитального магнитного момента (в отличие от $\hat{\mu}_s$ — оператора спинового магнитного момента).

Мы видим, что отношение орбитального магнитного момента $\hat{\mu}_l$ к механическому моменту $\hat{l}$, как и в классической физике, равняется $\frac{e}{2mc}$. Для спиновых моментов это отношение вдвое больше.

Уравнения (63,3) и (63,9) естественным образом обобщаются на случай системы частиц. Так, для системы частиц (с зарядом $e$, массой $m$), помещенных в слабое магнитное поле $\mathcal{H}$, уравнение Паули (63,9) имеет вид

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \frac{1}{2m}\sum_k \hat{p}_k^2\psi - \frac{e}{2mc}(\hat{L}\mathcal{H})\psi - \frac{e}{mc}(\hat{S}\mathcal{H}) + U_{вз}\psi, \quad (63,10)$$

где $\hat{L} = \sum_k \hat{l}_k$ — оператор полного орбитального, а $\hat{S} = \sum_k \hat{s}_k$ — полного спинового моментов системы (суммирование ведется по всем частицам системы), $U_{вз}$ — потенциальная энергия взаимодействия частиц между собой.

Не представляет труда учесть и член квадратичный по магнитному полю. Уравнение Паули в этом случае имеет вид

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \left\{\frac{1}{2m}\sum_k \hat{p}_k^2 - \frac{e}{2mc}(\hat{L} + 2\hat{S})\mathcal{H} + \frac{e^2}{8mc^2}\sum_k [\mathcal{H}r_k]^2 + U_{вз}\right\}\psi. \quad (63,11)$$

Мы увидим, что в некоторых случаях (см. § 75) квадратичный член играет существенную роль.

Если магнитное поле отсутствует и потенциальная энергия взаимодействия $U_{вз}$ не зависит от спинов частиц, например при кулоновском взаимодействии заряженных частиц, то гамильтониан системы не содержит спиновых переменных. В этом случае волновая функция может быть представлена в виде произведения соответственно координатной и спиновой волновых функций. Частицы могут находиться в произвольном спиновом состоянии, координатная же функция удовлетворяет обычному уравнению Шредингера.

## § 64. Тождественность частиц. Принцип тождественности частиц. Симметричные и антисимметричные состояния

Мы перейдем теперь к построению волновой функции системы частиц одного рода, например системы электронов, протонов, фотонов и т. п.

В таких системах проявляются новые важные особенности, не имеющие аналога в классической механике системы частиц. Эти особенности станут ясны из сравнения процесса соударения двух частиц — макроскопических и микроскопических.

В классической механике свойства каждой частицы характеризуются одной величиной — ее массой. Если массы обеих частиц равны, то частицы можно считать совершенно одинаковыми. Состояние каждой из частиц в момент $t = 0$ задается начальными условиями.

Двигаясь по определенным траекториям, частицы упруго сталкиваются в некоторой точке пространства и расходятся по соответствующим траекториям.

Если заданы начальные условия, то траектории каждой частицы полностью определены и за движением каждой частицы можно проследить. Поэтому в классической механике частицы, хотя бы и одинаковые, сохраняют свою индивидуальность. Всегда можно определить, какая именно из сталкивающихся частиц попала в данную точку пространства.

Совершенно иначе тот же процесс столкновения происходит с двумя микрочастицами. Пусть в момент соударения обе частицы находились в определенных точках пространства. При этом, согласно соотношению неопределенности, их импульсы не имели определенного значения. После соударения мы можем зафиксировать «траектории» частиц, например два следа в камере Вильсона. Ясно, однако, что если обе сталкивающиеся частицы были одной природы, — например сталкивались два электрона или два протона, — то какая именно из этих частиц связана с данным следом, установить принципиально невозможно.

В качестве второго примера рассмотрим систему, состоящую из двух атомов водорода.

Если атомы находятся на достаточно больших расстояниях друг от друга, так, что электронные облака не перекрываются, то каждый электрон практически локализован у своего ядра. По мере сближения атомов возникает перекрытие электронных облаков. Это означает, что в области перекрытия имеется некоторая вероятность нахождения обоих электронов.

Пусть в результате измерения в этой области обнаружен электрон. Ясно, что не существует никаких способов, которые

позволили бы установить, какой это электрон, принадлежащий ранее ядру № 1 или № 2.

Приведенные примеры показывают, что одинаковость квантовых частиц имеет гораздо более глубокую природу, чем «одинаковость» классических частиц. Квантовые частицы не просто одинаковы, но совершенно тождественны.

Если мы захотели бы изменить начальное состояние системы, заменив один электрон на другой, в системе не произошло бы никаких физических изменений, никаким физическим опытом невозможно обнаружить эту замену.

Необходимо подчеркнуть также, что в приведенных примерах мы несколько схематизировали ситуацию. Если, например, обе сталкивающиеся частицы имеют определенные значения импульсов, они не имеют никаких определенных значений координаты. Поэтому нельзя даже указать область столкновения.

Таким образом, мы приходим к принципу тождественности частиц, который можно сформулировать следующим образом: в системе тождественных частиц осуществляются лишь такие состояния, которые не меняются при перестановке местами любых двух тождественных частиц.

Тождественность микрочастиц приводит к весьма важным и глубоким следствиям. Напомним, что мы столкнулись уже с этим свойством микрочастиц в статистической физике. Сейчас мы более последовательно разберем, как тождественность частиц влияет на свойства их коллектива.

Рассмотрим систему, состоящую из $N$ тождественных частиц. Волновая функция такой системы $\psi$ будет иметь вид

$$\psi(\xi_1, \xi_2, \ldots, \xi_i, \ldots, \xi_k, \ldots, \xi_N, t).$$

Здесь под $\xi_i$ понимается вся совокупность координат и спиновых переменных, характеризующих $i$-ю частицу.

Если переставить между собой две частицы, т. е. заменить координаты и спин $i$-й частицы соответствующими величинами для $k$-й частицы и наоборот, то в силу принципа тождественности состояние системы не может измениться. Следовательно, волновая функция системы может измениться лишь на несущественный фазовый множитель.

После перестановки двух частиц волновую функцию можно выразить через исходную соотношением

$$\psi(\xi_1, \xi_2, \ldots, \xi_k, \ldots, \xi_i, \ldots, \xi_N, t) = \\ = e^{i\alpha}\psi(\xi_1, \xi_2, \ldots, \xi_i, \ldots, \xi_k, \ldots, \xi_N, t), \quad (64,1)$$

где $\alpha$ — некоторая вещественная величина. Если еще раз произ-

вести операцию перестановки $i$-й и $k$-й частиц, то система вернется в исходное состояние.

С другой стороны, производя повторно операцию (64,1), мы можем записать:

$$\psi(\xi_1, \xi_2, \ldots, \xi_k, \ldots, \xi_i, \ldots, \xi_N, t) = \\ = e^{i\alpha}\psi(\xi_1, \xi_2, \ldots, \xi_i, \ldots, \xi_k, \ldots, \xi_N, t) = \\ = e^{2i\alpha}\psi(\xi_1, \ldots, \xi_k, \ldots, \xi_i, \ldots, \xi_N, t).$$

Отсюда следует, что $e^{2i\alpha} = 1$ и

$$e^{i\alpha} = \pm 1.$$

Таким образом, при перестановке двух тождественных частиц волновая функция системы может или не измениться совсем, или изменить знак на обратный. Волновые функции первого типа называются симметричными, волновые функции второго типа — антисимметричными. Введем важный для дальнейшего оператор перестановок или обменный оператор $\hat{P}_{ik}$. По определению при воздействии оператора $\hat{P}_{ik}$ на волновую функцию системы частиц $\psi(\xi_1, \xi_2, \ldots, \xi_i, \ldots, \xi_k, \ldots, \xi_N, t)$ он переводит ее в новую функцию

$$\hat{P}_{ik}\psi(\xi_1, \ldots, \xi_i, \ldots, \xi_k, \ldots, \xi_N, t) = \\ = \psi(\xi_1, \ldots, \xi_k, \ldots, \xi_i, \ldots, \xi_N, t). \quad (64,2)$$

Этой замене соответствует переход $i$-й частицы в состояние, ранее занятое $k$-й частицей, а $k$-й частицы — в состояние $i$-й частицы.

Сравнивая (64,2) с (64,1), мы видим, что собственные значения оператора $\hat{P}_{ik}$ равны $e^{i\alpha} = \pm 1$. При этом симметричные и антисимметричные функции являются собственными функциями оператора $\hat{P}_{ik}$, отвечающими собственным значениям соответственно $+1$ и $-1$.

С помощью оператора перестановки покажем, что свойства симметрии сохраняются во времени. Это означает, что если система в первоначальный момент времени находилась в симметричном или антисимметричном состоянии, то никакое последующее воздействие не изменяет характера ее симметрии. Иными словами, система все время будет оставаться либо в симметричном, либо в антисимметричном состоянии. Для доказательства этого утверждения необходимо показать, что оператор $\hat{P}_{ik}$ коммутирует с оператором Гамильтона. Перестановка местами двух тождественных частиц отвечает лишь перестановке членов в сумме, образующей гамильтониан системы. Это легко видеть на примере системы, состоящей из двух тождественных частиц.

В этом случае гамильтониан может быть записан в форме

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_1 - \frac{\hbar^2}{2m}\Delta_2 + U(\xi_1, t) + U(\xi_2, t) + U_{12}(\xi_1, \xi_2, t). \quad (64,3)$$

Здесь $U_{12}(\xi_1, \xi_2, t)$ — энергия взаимодействия частиц, а $U$ отвечает взаимодействию с внешним полем и имеет, очевидно, для двух тождественных частиц одинаковый вид. При перестановке частиц для нового гамильтониана имеем:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_2 - \frac{\hbar^2}{2m}\Delta_1 + U(\xi_2, t) + U(\xi_1, t) + U_{12}(\xi_2, \xi_1, t). \quad (64,4)$$

Совершенно ясно, что это тот же гамильтониан, что и до перестановки. Полученный результат без труда переносится на случай системы из $N$ частиц. Мы видим, что перестановка частиц не изменяет гамильтониан. Поэтому получаем

$$\hat{H}\hat{P}_{ik} - \hat{P}_{ik}\hat{H} = 0. \quad (64,5)$$

Следовательно, свойства симметрии системы являются интегралом движения и сохраняются во времени.

Таким образом, естественно думать, что симметрия определяется свойствами самих элементарных частиц, которые составляют систему. Удалось показать, что частицы, обладающие целым спином, описываются симметричными функциями, а частицы с полуцелым спином — антисимметричными функциями. Первые частицы называют частицами Бозе — Эйнштейна или бозонами, вторые — частицами Ферми — Дирака (или фермионами). К первой группе частиц относятся: кванты света (см. гл. XII), $\pi$-мезоны и др. Ко второй: нейтроны, протоны, позитроны, электроны, нейтрино, $\mu$-мезоны (у всех спин $^1/_2$) и др.

Для выяснения вопроса о свойствах симметрии системы, состоящей из тождественных сложных частиц, следует определить полный спин сложной частицы. Так же как и в случае элементарных частиц, волновая функция при целом спине сложной частицы симметрична при перестановке местами сложных частиц и антисимметрична при полуцелом спине сложной частицы.

В виде примера рассмотрим систему, состоящую из $\alpha$-частиц. Для определения свойств симметрии волновой функции системы необходимо подсчитать полный спин $\alpha$-частицы. $\alpha$-частица состоит из двух нейтронов и двух протонов. Так как спины входящих в нее частиц равны $\hbar/2$, а число частиц четно, то полный спин $\alpha$-частицы равен лишь целому кратному $\hbar$. Таким образом, волновая функция системы $\alpha$-частиц является симметричной волновой функцией.

## § 65. Волновые функции для системы фермионов и бозонов. Принцип Паули

Рассмотрим систему, состоящую из $N$ невзаимодействующих между собой тождественных частиц. Уравнение Шредингера для стационарных состояний такой системы имеет вид

$$\sum_{i=1}^{N}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_i + U(\xi_i)\right]\psi(\xi_1, \xi_2, \ldots, \xi_N) = E\psi(\xi_1, \xi_2, \ldots, \xi_N). \quad (65,1)$$

В § 14 было показано, что решением этого уравнения служит функция

$$\psi = \psi_{k_1}(\xi_1)\psi_{k_2}(\xi_2)\ldots\psi_{k_N}(\xi_N). \quad (65,2)$$

Здесь $k_1, k_2, \ldots$ — квантовые числа состояний, в которых могут находиться частицы. Каждое $k_i$ представляет собой полный набор квантовых чисел, характеризующих состояние отдельной частицы. Функции $\psi_{ki}$ являются решением уравнения Шредингера для одной частицы

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_i\psi_{k_i}(\xi_i) + U(\xi_i)\psi_{k_i}(\xi_i) = E_{k_i}\psi_{k_i}(\xi_i).$$

Однако функция (65,2) не удовлетворяет требованиям симметрии. В общем случае она не принадлежит ни к симметричным, ни к антисимметричным функциям. Так как уравнение (65,1) линейно, то суперпозиция решений типа (65,2) будет также его решением. Для получения волновой функции, обладающей требуемой симметрией, следует взять соответствующую суперпозицию волновых функций.

Для простоты рассмотрим систему, состоящую всего из двух невзаимодействующих частиц. Несимметризованными волновыми функциями служат, очевидно,

$$\psi_1(\xi_1, \xi_2) = \psi_1(\xi_1)\psi_2(\xi_2); \quad \psi_2(\xi_1, \xi_2) = \psi_2(\xi_1)\psi_1(\xi_2),$$

где индексы 1 и 2 при волновых функциях $\psi_1(\xi_1)$, $\psi_1(\xi_2)$ и $\psi_2(\xi_1)$, $\psi_2(\xi_2)$ обозначают два разных состояния частицы. Волновые функции $\psi_1(\xi_1, \xi_2)$; $\psi_2(\xi_1, \xi_2)$ отвечают одной и той же энергии системы. Из этих функций можно составить две симметризованные комбинации, соответствующие той же энергии:

$$\psi_s = C_1[\psi_1(\xi_1)\psi_2(\xi_2) + \psi_2(\xi_1)\psi_1(\xi_2)],$$

$$\psi_a = C_2[\psi_1(\xi_1)\psi_2(\xi_2) - \psi_2(\xi_1)\psi_1(\xi_2)].$$

Первая волновая функция является симметричной относительно перестановки частиц, а вторая — антисимметричной. Постоянные $C_1$ и $C_2$ могут быть определены из условия нормировки. Если функции $\psi_1(\xi_1)$ и $\psi_2(\xi_2)$ нормировать на единицу,

а $\psi_s$ (и $\psi_a$) нормировать условием $\int |\psi_s|^2 dV_1\, dV_2 = 1$, то простое вычисление дает в обоих случаях

$$C_1 = C_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}.$$

Поэтому нормированные и симметризованные функции можно написать в виде

$$\psi_s = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_1(\xi_1)\psi_2(\xi_2) + \psi_2(\xi_1)\psi_1(\xi_2)], \tag{65,3}$$

$$\psi_a = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_1(\xi_1)\psi_2(\xi_2) - \psi_2(\xi_1)\psi_1(\xi_2)]. \tag{65,4}$$

Не представляет теперь труда обобщить формулы (65,3) и (65,4) на случай произвольного числа невзаимодействующих частиц. Именно, для системы бозонов, описываемой симметричными функциями, имеем

$$\psi_s = \left(\frac{n_1! n_2! \ldots}{N!}\right)^{1/2} \sum_P \psi_{k_1}(\xi_1)\psi_{k_2}(\xi_2) \ldots \psi_{k_N}(\xi_N), \tag{65,5}$$

где суммирование ведется по всем возможным перестановкам разных индексов $k_1 \ldots k_N$. Через $n_i$ обозначено число индексов, принимающих одно и то же $i$-е значение. Таким образом, числа $n_i$ показывают, сколько частиц находится в данном $\psi_i$-состоянии, причем $\sum_i n_i = N$. Волновая функция (65,5) нормирована на единицу. Действительно, из-за ортогональности функции $\psi_k(\xi)$ вклад в нормировочный интеграл дают лишь квадраты модуля каждого члена суммы. Число членов суммы равно $\frac{N!}{n_1! n_2! \ldots}$. Аналогично, для системы фермионов получаем

$$\psi_a = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \psi_{k_1}(\xi_1) \ldots \psi_{k_1}(\xi_N) \\ \psi_{k_2}(\xi_1) \ldots \psi_{k_2}(\xi_N) \\ \cdots\cdots\cdots \\ \psi_{k_N}(\xi_1) \ldots \psi_{k_N}(\xi_N) \end{vmatrix}. \tag{65,6}$$

Симметризованные нормированные волновые функции $\psi_s$ и $\psi_a$ описывают состояние системы $N$ невзаимодействующих бозонов и фермионов соответственно.

Рассмотрим теперь, как изменится волновая функция системы, если между тождественными частицами существует взаимодействие. Предположим, что оно является зависящим от времени. Точная волновая функция может быть написана в виде

одной из суперпозиций

$$\psi = \sum_i c_i(t)(\psi_s)_i, \qquad \psi = \sum_k c_k(t)(\psi_a)_k.$$

Коэффициенты $c_i$ и $c_k$ представляют зависящие от времени амплитуды вероятности соответствующих $i$-х и $k$-х симметричных и антисимметричных состояний.

Взаимодействие вызывает переходы в системе. Как это непосредственно следует из закона сохранения симметрии, изложенного в предыдущем параграфе, при любых внешних воздействиях система будет переходить в состояния с той же симметрией.

Таким образом, волновая функция, описывающая систему взаимодействующих частиц, выражается через волновые функции системы невзаимодействующих частиц с определенной симметрией.

Найденные волновые функции (65,5) и (65,6) позволяют получить ряд важнейших результатов.

Рассмотрим прежде всего систему ферми-частиц. Предположим, что две частицы в системе находятся в одном и том же квантовом состоянии, т. е. $k_1 = k_2$. Это означает, что две частицы имеют одинаковый полный набор квантовых чисел, например одно и то же значение квантовых чисел $n$, $l$, $m$, $s_z$ при движении в поле с центральной симметрией или $p_x$, $p_y$, $p_z$, $s_z$ при свободном движении с определенным импульсом.

Тогда в определителе (65,6) две строки оказываются одинаковыми, и волновая функция обратится в нуль тождественно. Тем самым доказано следующее утверждение: при измерении в системе тождественных частиц Ферми не может быть одновременно обнаружено две или более частиц в одном и том же квантовом состоянии. Это известный принцип Паули, установленный им на основании анализа опытных данных еще до появления квантовой механики.

Часто принцип Паули удобно формулировать в терминах квазиклассического приближения: «в каждой ячейке фазового пространства объемом $(2\pi\hbar)^3$ не может находиться более одной частицы с данной ориентацией спина».

Принцип Паули, как мы видели в статистической физике, определяет статистическое поведение систем, построенных из тождественных частиц с полуцелым спином. Не меньшее значение имеет принцип Паули для понимания закономерностей построения многоэлектронных атомов и сложных ядер, разбору которых будет посвящена следующая глава.

Для дальнейшего рассмотрим следующую задачу. Пусть система состоит из $N$ тождественных частиц (бозонов). Каждый из бозонов находится в данный момент времени в одном и том

же состоянии с волновой функцией $\psi(\xi)$, которая нормирована следующим образом:

$$\int \psi^*(\xi)\,\psi(\xi)\,dV = N.$$

Определим среднюю энергию системы в этом состоянии. Гамильтониан такой системы частиц запишем в виде

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^{N} \hat{H}_i(\xi_i) + \frac{1}{2}\sum_i \sum_j \hat{W}_{ij}(\xi_i,\ \xi_j), \qquad (65{,}7)$$

где $\hat{H}_i$ — оператор энергии $i$-го бозона и $\hat{W}_{ij}$ — оператор энергии взаимодействия $i$-го и $j$-го бозонов. Волновая функция системы бозонов, нормированная на единицу, имеет в этот момент времени вид

$$\psi(\xi_1,\ \xi_2,\ \ldots,\ \xi_N) = \frac{1}{\sqrt{N^N}}\,\psi(\xi_1)\,\psi(\xi_2)\ldots\psi(\xi_N).$$

Средняя энергия системы в этом состоянии равна

$$\overline{H} = \int \psi^*(\xi_1,\ \xi_2,\ \ldots,\ \xi_N)\,\hat{H}\psi(\xi_1,\ \xi_2,\ \ldots,\ \xi_N)\,dV_1 dV_2\ldots dV_N.$$

Учитывая тождественность бозонов и считая $N \gtrsim 1$, получаем

$$\overline{H} = \int \psi^*(\xi_i)\,\hat{H}_i\psi(\xi_i)\,dV_i + \\ + \frac{1}{2}\int \psi^*(\xi_i)\,\psi^*(\xi_j)\,\hat{W}_{ij}(\xi_i,\ \xi_j)\,\psi(\xi_i)\,\psi(\xi_j)\,dV_i\,dV_j. \qquad (65{,}8)$$

Если частицы не взаимодействуют, то $\overline{W} \equiv 0$, и среднее значение энергии имеет вид

$$\overline{H} = \int \psi^*(\xi_i)\,\hat{H}_i\psi(\xi_i)\,dV_i. \qquad (65{,}9)$$

Выражения (65,8) и (65,9) потребуются нам для дальнейшего.

## § 66. Волновая функция системы из двух тождественных частиц со спином $^1/_2$

Имея в виду дальнейшие приложения, рассмотрим более подробно волновую функцию системы, состоящей из двух частиц со спином $^1/_2$, например двух электронов или протонов.

Полная волновая функция $\psi_n(\boldsymbol{r}_1,\ s_{1z},\ \boldsymbol{r}_2,\ s_{2z})$ зависит от пространственных и спиновых координат обеих частиц и антисимметрична в этих переменных. Предполагая, что внешнее магнитное поле отсутствует, а взаимодействие между частицами не зависит от их спинов, представим полную волновую функцию в виде произведения волновых функций, зависящих только от пространственных и от спиновых переменных.

$$\psi_n(\boldsymbol{r}_1,\ s_{1z},\ \boldsymbol{r}_2,\ s_{2z}) = \Phi(\boldsymbol{r}_1,\ \boldsymbol{r}_2)\,\varphi(s_{1z},\ s_{2z}). \qquad (66{,}1)$$

Полную спиновую функцию системы $\varphi$ представим в виде произведения собственных функций оператора квадрата спина и его проекции на ось $z$ каждой из частиц, т. е. функций $\varphi_{1/2}(1)$, $\varphi_{-1/2}(1)$, $\varphi_{1/2}(2)$, $\varphi_{-1/2}(2)$, где индекс означает проекцию спина на ось $z$, а число в скобках — номер частицы.

В самом общем виде функцию $\varphi$ можно записать так:

$$\varphi(1,\ 2) = c_1\varphi_{1/2}(1)\,\varphi_{1/2}(2) + c_2\varphi_{-1/2}(1)\,\varphi_{-1/2}(2) + \\ + c_3\varphi_{1/2}(1)\,\varphi_{-1/2}(2) + c_4\varphi_{-1/2}(1)\,\varphi_{1/2}(2), \quad (66{,}2)$$

где $c_1$, $c_2$, $c_3$ и $c_4$ — произвольные амплитуды.

Определим спиновые волновые функции, описывающие состояния с заданным полным спином системы и его проекцией на ось $z$.

Так как спины складываются по общим правилам сложения моментов (см. § 52), то полный спин системы из двух частиц принимает два значения $S = 1$ и $S = 0$. Его проекция на ось $z$ соответственно имеет значения 1, 0 и —1 при $S = 1$ и $S_z = 0$ при $S = 0$ (в единицах $\hbar$).

Функции $\varphi$, описывающие состояние с заданными $S$ и $S_z$, удовлетворяют уравнениям

$$\left.\begin{aligned} \hat{\boldsymbol{S}}^2\varphi &= \hbar^2 S(S+1)\,\varphi, \\ \hat{S}_z\varphi &= \hbar S_z\varphi, \end{aligned}\right\} \quad (66{,}3)$$

где $\hat{\boldsymbol{S}} = \hat{\boldsymbol{s}}_1 + \hat{\boldsymbol{s}}_2$ — оператор полного спина системы. Коэффициенты $c_1$, $c_2$, $c_3$ и $c_4$ в спиновой функции системы (66,2) должны быть подобраны так, чтобы оба уравнения (66,3) для $\varphi$ были автоматически удовлетворены.

Непосредственной проверкой нетрудно убедиться, что спиновая функция системы, отвечающая всем указанным условиям, может быть написана в виде [1])

$$\left.\begin{aligned} \varphi_1^1 &= \varphi_{1/2}(1)\,\varphi_{1/2}(2), \quad S = 1,\ S_z = 1, \\ \varphi_0^1 &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\varphi_{1/2}(1)\,\varphi_{-1/2}(2) + \varphi_{-1/2}(1)\,\varphi_{1/2}(2)\right], \quad S = 1,\ S_z = 0, \\ \varphi_{-1}^1 &= \varphi_{-1/2}(1)\,\varphi_{-1/2}(2), \quad S = 1,\ S_z = -1, \end{aligned}\right\} \quad (66{,}4)$$

$$\varphi_0^0 = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\varphi_{1/2}(1)\,\varphi_{-1/2}(2) - \varphi_{-1/2}(1)\,\varphi_{1/2}(2)\right], \quad S = 0,\ S_z = 0, \quad (66{,}5)$$

где верхний индекс указывает полный спин двух частиц, а нижний — его проекцию на ось $z$.

---

[1]) Выражения (66,4), (66,5) следуют из формулы (52,3) и таблицы коэффициентов $C$ (стр. 209) при $j_1 = 1/2$.

Этот результат можно получить также, основываясь на соотношениях (61,18). Заметим, что спиновые функции (66,4) не изменяются при перестановке местами первой и второй частиц, т. е. при замене $1 \to 2$, $2 \to 1$. Следовательно, эти функции симметричны в спинах частиц. Спиновая функция (66,5) изменяет знак при такой перестановке и является антисимметричной в спинах.

Спиновые функции (66,4) образуют спиновый триплет. Совокупность трех компонент триплета эквивалентна трехкомпонентной спиновой функции частицы со спином единица. Спиновая функция (66,5), описывающая состояние со спином, равным нулю, образует спиновый синглет.

Определим собственные значения скалярного произведения $(\hat{s}_1 \hat{s}_2)$ в синглетном и триплетном состояниях. С этим произведением нам придется иметь дело в дальнейшем. Поскольку

$$\hat{\boldsymbol{S}}^2 = (\hat{\boldsymbol{s}}_1 + \hat{\boldsymbol{s}}_2)^2 = \hat{\boldsymbol{s}}_1^2 + \hat{\boldsymbol{s}}_2^2 + 2(\hat{\boldsymbol{s}}_1 \hat{\boldsymbol{s}}_2),$$

то

$$(\hat{\boldsymbol{s}}_1 \hat{\boldsymbol{s}}_2) = \frac{1}{2}(\hat{\boldsymbol{S}}^2 - \hat{\boldsymbol{s}}_1^2 - \hat{\boldsymbol{s}}_2^2). \tag{66,6}$$

Подставляя в правую часть собственные значения операторов $\hat{\boldsymbol{S}}^2$, $\hat{\boldsymbol{s}}_1^2$ и $\hat{\boldsymbol{s}}_2^2$, имеем:

$$(\hat{\boldsymbol{s}}_1 \hat{\boldsymbol{s}}_2)\varphi^S = \frac{\hbar^2}{2}\left(S(S+1) - \frac{3}{2}\right)\varphi^S. \tag{66,7}$$

Для триплетного состояния $S = 1$ и

$$(\hat{\boldsymbol{s}}_1 \hat{\boldsymbol{s}}_2)\varphi^1 = \frac{1}{4}\hbar^2\varphi^1. \tag{66,8}$$

Соответственно для синглетного состояния $S = 0$

$$(\hat{\boldsymbol{s}}_1 \hat{\boldsymbol{s}}_2)\varphi^0 = -\frac{3}{4}\hbar^2\varphi^0. \tag{66,9}$$

Рассмотрим теперь функцию от пространственных переменных $\Phi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2)$. Так как полная волновая функция (66,1) антисимметрична, то координатная волновая функция будет антисимметричной в состоянии $S = 1$ и симметричной в состоянии $S = 0$. Если частицы не взаимодействуют и находятся в некоторых состояниях $\psi_n$ и $\psi_m$, то координатная функция имеет вид

$$\Phi_a(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_n(\boldsymbol{r}_1)\psi_m(\boldsymbol{r}_2) - \psi_m(\boldsymbol{r}_1)\psi_n(\boldsymbol{r}_2)], \quad S = 1, \tag{66,10}$$

$$\Phi_s(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_n(\boldsymbol{r}_1)\psi_m(\boldsymbol{r}_2) + \psi_m(\boldsymbol{r}_1)\psi_n(\boldsymbol{r}_2)], \quad S = 0. \tag{66,11}$$

В общем случае удобно перейти, как это показано в § 14, к координатам $\boldsymbol{R} = \frac{1}{2}(\boldsymbol{r}_1 + \boldsymbol{r}_2)$ и $\boldsymbol{r} = \boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_2$, описывающим соответственно движение центра тяжести системы и относительное движение частиц,

$$\Phi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2) = \psi_0(\boldsymbol{R})\,\psi(\boldsymbol{r}). \tag{66,12}$$

Выясним, к каким следствиям приводит требование симметрии или антисимметрии волновой функции (66,12). Заметим прежде всего, что если потенциал взаимодействия частиц зависит только от расстояния между ними, $U(|\boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_2|)$, то в такой системе сохраняется орбитальный момент количества движения, связанный с относительным движением частиц (см. § 35). Произведем теперь перестановку координат частиц $\boldsymbol{r}_1 \to \boldsymbol{r}_2$, $\boldsymbol{r}_2 \to \boldsymbol{r}_1$. При такой перестановке радиус-вектор центра тяжести $\boldsymbol{R}$ не изменяется. Следовательно, не изменяется и волновая функция $\psi_0(\boldsymbol{R})$. Радиус-вектор относительного движения $\boldsymbol{r}$ меняет знак $\boldsymbol{r} \to -\boldsymbol{r}$. Если орбитальный момент, связанный с относительным движением частиц, задан и определяется квантовым числом $l$, то закон преобразования функции $\psi(\boldsymbol{r})$ при замене $\boldsymbol{r}$ на $-\boldsymbol{r}$, как мы выяснили в § 33, будет:

$$\psi(-\boldsymbol{r}) = (-1)^l\,\psi(\boldsymbol{r}). \tag{66,13}$$

Мы видим, что в этом случае координатная волновая функция (66,12) при перестановке частиц $\boldsymbol{r}_1 \to \boldsymbol{r}_2$, $\boldsymbol{r}_2 \to \boldsymbol{r}_1$ преобразуется по закону

$$\Phi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2) \to (-1)^l\,\Phi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2). \tag{66,14}$$

Из (66,14) сразу следует, что если частицы находятся в триплетном состоянии $S = 1$, то квантовое число $l$ может принимать лишь нечетные значения. Наоборот, число $l$ может принимать лишь четные значения, если частицы находятся в синглетном состоянии $S = 0$.

## § 67. Обменное взаимодействие и понятие о химическом и сильном ядерном взаимодействиях

Тождественность квантовых частиц приводит к фундаментальному изменению представления о взаимодействии между частицами.

Остановимся прежде всего на одном простом примере, позволяющем понять сущность этих изменений. Предположим, что две тождественные частицы с полуцелым спином не взаимодействуют друг с другом в классическом понимании этого слова. Это означает, что в гамильтониане системы нет членов, описывающих взаимодействие между частицами.

Пусть одна из частиц находится в некоторой ячейке фазового пространства с линейным размером ячейки $\sim d$. Имеет место очевидное соотношение

$$(\Delta q_1 \Delta p_1)^3 \sim d^3 (\Delta p_1)^3 \sim \hbar^3,$$

где $\Delta q_1 \sim d$ — неопределенность координаты частицы и $\Delta p_1 \sim \frac{\hbar}{d}$ — неопределенность ее импульса.

Согласно принципу Паули вторая частица не может попасть в ту же ячейку фазового пространства. Поэтому она должна либо находиться на расстоянии, большем $d$, от первой частицы, либо иметь импульс $p_2$, превышающий $\Delta p_1$, т. е. импульс $p_2 > \frac{\hbar}{d}$. Только при этом условии она может подойти к первой частице на расстояние, меньшее чем $d$, и попасть при этом в другую клетку фазового пространства.

Мы видим, что частицы с параллельными спинами не могут подойти друг к другу, если только они не обладают достаточно большим импульсом относительного движения. Такое поведение частиц эквивалентно появлению некоторых сил отталкивания между ними. Если спины частиц антипараллельны, предыдущее рассуждение теряет силу, поскольку принцип Паули не запрещает таким частицам находиться в одной ячейке фазового пространства.

Таким образом, из принципа Паули, налагающего ограничения на состояния частиц, вытекает факт существования взаимодействия между частицами, зависящего от ориентации их спинов.

Взаимодействие между бозонами не может быть проиллюстрировано на столь же наглядном примере. Тем не менее ясно, что требование симметризации волновой функции соответствует определенной зависимости энергии системы частиц от ее полного спина, т. е. приводит ко взаимодействию между частицами.

Предположим теперь, что между двумя частицами со спином $^1/_2$ имеется некоторое слабое взаимодействие, описываемое оператором $\hat{H}'(r_{12})$, где $r_{12}$ — расстояние между частицами. Для наглядности, а также имея в виду дальнейшие приложения, допустим, что $\hat{H}'$ представляет кулоновское отталкивание двух зарядов $\hat{H}'(r_{12}) = \frac{e^2}{r_{12}}$. Тогда средняя энергия взаимодействия в первом приближении равна

$$E^{(1)} = \sum \int \psi_0^* \hat{H}' \psi_0 \, dV_1 \, dV_2. \tag{67,1}$$

Здесь $\psi_0$ — нормированная функция невозмущенного состояния,

а суммирование ведется по всем значениям спиновых переменных.

Так как, по предположению, в нулевом приближении частицы считаются невзаимодействующими, то спиновые и координатные волновые функции разделяются, причем последние записываются симметризованными или антисимметризованными произведениями (66,10) и (66,11).

Подставляя значение оператора $\hat{H}'$ и волновые функции в (67,1), имеем

$$E^{(1)} = \frac{1}{2}\int \frac{e^2}{r_{12}} |\psi_{n_1}(1)\psi_{n_2}(2) \pm \psi_{n_1}(2)\psi_{n_2}(1)|^2 \, dV_1 \, dV_2 =$$

$$= e^2 \int \frac{|\psi_{n_1}(1)|^2 \, |\psi_{n_2}(2)|^2}{r_{12}} \, dV_1 dV_2 \pm e^2 \int \frac{\psi^*_{n_1}(1)\,\psi^*_{n_2}(2)\,\psi_{n_1}(2)\psi_{n_2}(1)}{r_{12}} \, dV_1 \, dV_2,$$

где цифры 1 и 2 обозначают координаты соответственно первого и второго электронов, а $r_{12}$ — расстояние между ними. Знаки + и — относятся к состоянию частиц, соответственно симметричному и антисимметричному относительно перестановки частиц. В этой формуле проведено суммирование по спиновым переменным, которое дало единицу. Мы воспользовались, кроме того, очевидным равенством

$$\int \psi^*_{n_1}(1)\,\psi^*_{n_2}(2)\frac{e^2}{r_{12}}\psi_{n_1}(2)\,\psi_{n_2}(1)\, dV_1 \, dV_2 =$$

$$= \int \psi_{n_1}(1)\,\psi_{n_2}(2)\frac{e^2}{r_{12}}\psi^*_{n_1}(2)\,\psi^*_{n_2}(1)\, dV_1 \, dV_2 .$$

В последнем равенстве один интеграл переходит в другой при замене индексов интегрирования 1 на 2.

Вводя обозначения

$$C = \int |\psi_{n_1}(1)|^2 \frac{e^2}{r_{12}} |\psi_{n_2}(2)|^2 \, dV_1 \, dV_2 =$$

$$= \int |\psi_{n_1}(1)|^2 \hat{H}'(r_{12}) \, |\psi_{n_2}(2)|^2 \, dV_1 \, dV_2, \quad (67,2)$$

$$A = \int \left\{ \psi^*_{n_1}(1)\,\psi^*_{n_2}(2)\frac{e^2}{r_{12}}\psi_{n_1}(2)\,\psi_{n_2}(1)\right\} dV_1 \, dV_2 =$$

$$= \int \left\{\psi^*_{n_1}(1)\,\psi^*_{n_2}(2)\,\hat{H}'(r_{12})\,\psi_{n_1}(2)\,\psi_{n_2}(1)\right\} dV_1 dV_2, \quad (67,3)$$

напишем энергию взаимодействия (67,1) в виде

$$E^{(1)}_{\uparrow\downarrow} = C + A, \quad (67,4)$$

$$E^{(1)}_{\uparrow\uparrow} = C - A. \quad (67,5)$$

Значок $\uparrow\downarrow$ означает антипараллельные спины (спиновый синглет), $\uparrow\uparrow$ — параллельные спины (спиновый триплет).

Из вывода ясно, что общий вид полученных формул (67,4) — (67,5) не является специфическим, относящимся только к случаю кулоновского взаимодействия, а мог бы быть получен для любой энергии взаимодействия, зависящей от координат частиц.

Интересно сравнить этот результат с аналогичным вычислением для двух частиц различной природы. Тогда мы написали бы для несимметризованной волновой функции $\Psi = \psi_{n_1}(1)\psi_{n_2}(2)$ и соответственно получили бы:

$$E' = \int |\psi_{n_1}|^2 |\psi_{n_2}|^2 \frac{e^2}{r_{12}} dV_1\, dV_2. \qquad (67,6)$$

Формула (67,6) имеет простой смысл — она представляет среднее значение энергии кулоновского отталкивания двух частиц. Положение одной из частиц, находящейся в состоянии $n_1$, характеризуется плотностью вероятности $|\psi_{n_1}(1)|^2$, второй — $|\psi_{n_2}(2)|^2$.

В формулах (67,4) и (67,5) интеграл $C$ имеет структуру, аналогичную (67,6) и часто именуется кулоновским интегралом. Однако, строго говоря, он не допускает подобной интерпретации, так как нельзя указать, какая из тождественных частиц находится в состоянии $n_1$, а какая — в состоянии $n_2$.

Интеграл $A$, именуемый обычно обменным (нем. Austausch — обмен), не имеет каких-либо классических аналогов. Расчеты, проведенные для конкретных систем, показывают, что интегралы $C$ и $A$ всегда положительны. Из формул (67,4) и (67,5) непосредственно следует, что поправка к средней энергии, обусловленная взаимодействием частиц, зависит от ориентации их спинов.

Подчеркнем прежде всего, что было бы неправильным считать взаимодействие складывающимся из двух частей — классической и обменной, как это часто делают для наглядности. При этом классической частью взаимодействия называют вклад в энергию, определяемый кулоновским интегралом $C$, а обменной — соответствующий вклад от обменного интеграла $A$. В действительности разделить взаимодействие на две части невозможно, поскольку сама величина $A$ не допускает классической интерпретации.

Наиболее характерная часть обменного взаимодействия выражается интегралом $A$ (67,3). Этот интеграл можно трактовать как матричный элемент, соответствующий переходу первой частицы из состояния $n_2$ в состояние $n_1$, а второй частицы из состояния $n_1$ в состояние $n_2$. Действительно, введем оператор $\hat{P}_{12}$, определенный формулой (64,2), переставляющий частицы местами, так что

$$\hat{P}_{12}\psi_{n_1}(1)\psi_{n_2}(2) = \psi_{n_1}(2)\psi_{n_2}(1), \qquad \hat{P}_{12}\psi_{n_2}(1)\psi_{n_1}(2) = \psi_{n_1}(1)\psi_{n_2}(2).$$

Оператор $\hat{P}_{12}$ является, таким образом, обменным оператором первой и второй частицы. С помощью этого оператора интеграл $A$ можно представить как

$$A = \int \psi_{n_1}^*(1)\,\psi_{n_2}^*(2)\,\hat{H}_{12}\psi_{n_1}(2)\,\psi_{n_2}(1)\,dV_1\,dV_2 =$$
$$= \int \psi_{n_1}^*(1)\,\psi_{n_2}^*(2)\,\hat{H}_{12}\hat{P}_{12}\psi_{n_1}(1)\,\psi_{n_2}(2)\,dV_1\,dV_2. \quad (67,7)$$

Таким образом, обменное взаимодействие отвечает замене оператора $\hat{H}_{12}$ на оператор $\hat{H}_{12}\hat{P}_{12}$. Полная энергия взаимодействия с помощью обменного оператора может быть записана в виде

$$E' = C \pm A = \int \psi_{n_1}^*(1)\,\psi_{n_2}^*(2)\left(\hat{H}_{12} \pm \hat{H}_{12}\hat{P}_{12}\right)\psi_{n_1}(1)\,\psi_{n_2}(2)\,dV_1\,dV_2. \quad (67,7')$$

Мы видим, что тождественность квантовомеханических частиц существенно изменяет их взаимодействие. Если различные по своей природе частицы обладают произвольным взаимодействием, характеризующимся оператором $\hat{H}_{12}$, то в случае тождественных частиц оператор этого взаимодействия должен быть заменен на $\hat{H}_{12} \pm \hat{H}_{12}\hat{P}_{12}$. Этот вывод не зависит от природы взаимодействия, т. е. от характера оператора $\hat{H}_{12}$. Так электрическое взаимодействие двух тождественных частиц (например, двух позитронов) происходит иначе, чем такое же электрическое взаимодействие различных частиц (например, позитрона и протона).

Таким образом, специфика тождественных частиц, состояние которых характеризуется симметризованными волновыми функциями, приводит к важнейшему общему следствию: состояние системы оказывается зависящим от суммарного спина системы.

Это обстоятельство является количественным выражением тех качественных соображений, которые были приведены в начале параграфа.

Зависимость энергии системы частиц от полного спина эквивалентна утверждению о существовании взаимодействия между частицами. Это взаимодействие получило название обменного.

Обменное взаимодействие имеет специфически квантовый характер. Формально это следует из того факта, что в классическом пределе спин системы обращается в нуль (ср. § 60). Поэтому при переходе к классическому пределу исчезает всякое различие между состояниями с разным спином и, в частности, различие в их энергиях.

Следует подчеркнуть, что хотя до сих пор речь шла о частицах с полуцелым спином, качественный вывод в равной мере применим к частицам с целым спином — бозонам. В системе из

двух бозонов, имеющих спин нуль, реализуются не все состояния, которые получаются в результате формального решения соответствующего уравнения Шредингера.

Физическим состояниям системы и определенным значениям ее энергии отвечают только те из них, которым отвечает симметричная в частицах волновая функция. В случае двух бозонов со спином 1 энергия системы также оказывается зависящей от полного спина.

Результаты, полученные для системы, состоящей из двух частиц — фермионов или бозонов, — непосредственно переносятся на общий случай систем с произвольным числом тождественных частиц.

Возвращаясь к примеру с взаимодействием двух электронов, покажем, что обменные силы допускают следующую наглядную, хотя и не строгую интерпретацию: предположим, что в момент времени $t = 0$ первый электрон находился в состоянии $n_1$, а второй — в состоянии $n_2$. Необходимо еще раз подчеркнуть, что в действительности такая формулировка относится к моменту $t = 0$ и дальнейшие рассуждения служат лишь для придания наглядности эффекту обменного взаимодействия. Тогда начальная волновая функция имеет вид

$$\Phi(0) \equiv \frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_a(t=0) + \psi_s(t=0)] = \psi_{n_1}(1)\,\psi_{n_2}(2).$$

Состояния, описываемые симметричной $\psi_s$ и антисимметричной $\psi_a$ волновой функцией, являются стационарными состояниями с энергиями соответственно

$$E_s = E + C + A, \quad E_a = E + C - A.$$

Поэтому зависимость волновых функций $\psi_s$ и $\psi_a$ от времени дается формулами

$$\psi_s = \psi_s(0)\,e^{-\frac{i}{\hbar}(E+C+A)\,t}, \quad \psi_a = \psi_a(0)\,e^{-\frac{i}{\hbar}(E+C-A)\,t}.$$

Полная волновая функция $\Phi(t)$ при $t > 0$ является их суперпозицией и, следовательно, не описывает стационарного состояния

$$\Phi(t) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_s(t) + \psi_a(t)) =$$

$$= \frac{1}{2}\Big\{[\psi_{n_1}(1)\,\psi_{n_2}(2) + \psi_{n_2}(1)\,\psi_{n_1}(2)]\,e^{-\frac{i}{\hbar}(E+C+A)\,t} +$$

$$+ [\psi_{n_1}(1)\,\psi_{n_2}(2) - \psi_{n_2}(1)\,\psi_{n_1}(2)]\,e^{-\frac{i}{\hbar}(E+C-A)\,t}\Big\} =$$

$$= \Big\{\psi_{n_1}(1)\,\psi_{n_2}(2)\cos\frac{1}{\hbar}At - i\psi_{n_2}(1)\,\psi_{n_1}(2)\sin\frac{1}{\hbar}At\Big\}\,e^{-\frac{i}{\hbar}(E+C)\,t}. \quad (67{,}8)$$

Формула (67,8) показывает, что если в момент времени $t = 0$ электрон 1 находился в состоянии $n_1$, а электрон 2 — в состоянии $n_2$, то по прошествии промежутка времени

$$\tau = \frac{\pi\hbar}{2A} \tag{67,9}$$

электроны обмениваются состояниями. Волновая функция

$$-i\psi_{n_2}(1)\,\psi_{n_1}(2)\,e^{-\frac{i}{\hbar}(E+C)\,t}$$

отвечает нахождению первого электрона в состоянии $n_2$, а второго — в состоянии $n_1$. По прошествии промежутка времени $2\tau$ они возвращаются в начальные состояния и т. д. Таким образом, электроны обмениваются состояниями с периодом $\tau$.

Часто такой обмен состояниями наглядно представляют следующим образом: один из электронов системы вылетает, например, из атома и поглощается другим атомом. Из последнего в свою очередь вылетает электрон, переходящий в первый атом. В процессе «вылета» и «захвата» электронов происходит изменение импульса соответствующих атомов. Изменение импульса атомов означает, что между ними имеется некоторое взаимодействие. Это схематическое и наглядное рассмотрение обменного взаимодействия оправдывает термин «обмен». Однако его не следует понимать буквально.

Это особенно ясно видно из следующего рассуждения: пусть состояния $n_1$ и $n_2$ отвечают связанным состояниям электронов в двух атомах. Если бы мы попытались понимать описанный выше процесс обмена буквально, в классическом смысле, то возникло бы противоречие. Действительно, электроны не смогли бы обмениваться состояниями или «вылетать» и «захватываться» атомами, так как для этого они должны были бы получать извне некоторую энергию, превышающую энергию их связи в атомах. В действительности каждый из двух атомов, между которыми имеет место обменное взаимодействие, не находится в состоянии с определенной энергией. Неопределенность энергии системы $\Delta E$ имеет порядок $\Delta E \sim A$. Не имеет смысла говорить о постоянстве энергии в течение промежутка времени $\tau$ — времени обмена, равного по порядку величины

$$\Delta E\,\Delta t \sim A\tau \sim \hbar.$$

В течение времени $\tau$ система не находится в состоянии с определенной энергией и импульсом. При этом оба электрона находятся в состоянии с волновой функцией $\Phi(t)$.

В связи с этим ясно, что было бы недопустимым указывать направление вектора импульса отдачи атомов при «перебросе» электронов и пытаться, исходя из этого, определить знак

энергии взаимодействия. Таким образом, говоря об обмене частицами, следует помнить, что этот обмен имеет виртуальный, а не действительный характер. Слово виртуальный означает, что непосредственный смысл имеют только начальное и конечное состояния системы.

Для того чтобы обменный интеграл $A$ имел отличные от нуля значения, волновые функции частиц $\psi_{n_1}$ и $\psi_{n_2}$ должны достаточно сильно перекрываться, т. е. быть отличными от нуля в одной и той же области пространства. Если, напротив, волновые функции $\psi_{n_1}$ и $\psi_{n_2}$ отличны от нуля в различных областях пространства, то обменный интеграл обращается в нуль. Если, в частности, $\psi_{n_1}$ и $\psi_{n_2}$ — волновые функции, описывающие связанные состояния электронов в различных атомах, то обменное взаимодействие возможно лишь при непосредственном сближении атомов. Пусть, далее, волновые функции отвечают двум связанным состояниям в атоме. Например, $n_1$ — нормальное, а $n_2$ — одно из возбужденных состояний. Тогда величина обменного интеграла чрезвычайно быстро уменьшается с переходом к высшим возбужденным состояниям, когда состояния $n_1$ и $n_2$ обладают существенно различными энергиями. Наконец, когда речь идет о взаимодействии свободных частиц, описываемых плоскими волнами, то обменный интеграл отличен от нуля только для частиц, имеющих близкие по величине значения импульсов. Если, например, импульсы частиц заметно отличаются друг от друга, а энергия взаимодействия изменяется с координатами сравнительно медленно, то в $A$ под интегралом содержится произведение плавно изменяющейся и быстроосциллирующей функции. При этом весь интеграл мал. Таким образом, заметное обменное взаимодействие может иметь место лишь для тождественных частиц, находящихся в близких состояниях — локализованных в малой области пространства или имеющих близкие значения энергии и импульса.

Из этого свойства обменного взаимодействия вытекает важнейшее следствие: обменное взаимодействие обладает свойством насыщения, так что в системе из большого числа $N$ тождественных частиц полная энергия обменного взаимодействия пропорциональна числу частиц $N$. Действительно, две частицы, связанные обменным взаимодействием, например два электрона с антипараллельными спинами, не могут присоединить к себе третьей частицы.

Если обычная энергия парного взаимодействия пропорциональна числу пар, т. е. $\frac{N(N-1)}{2}$, то в обменное взаимодействие вступают не все пары, а лишь те, в которые входят частицы, находящиеся в «близких» состояниях (в указанном выше смысле). Поэтому полное число частиц, связанных обменным

взаимодействием, равно числу пар, построенных из частиц, находящихся в близких состояниях. Это число пар равно, очевидно, $\frac{N}{2}$.

В заключение укажем на следующее обстоятельство: вывод формул для энергии взаимодействия был проведен в предположении, что оператор взаимодействия не содержит величин, зависящих от спина частиц. Однако к таким же результатам можно прийти и в том случае, когда оператор взаимодействия содержит операторы спинов.

Обменное взаимодействие между тождественными частицами играет важнейшую роль в природе.

Достаточно указать, что обменный характер имеют силы, обусловливающие существование гомеополярной химической связи, взаимодействие, ответственное за образование кристаллов, явление ферромагнетизма и, наконец, взаимодействие между частицами в атомных ядрах — ядерные силы. К проблеме химической связи мы вернемся еще в § 79, а пока кратко остановимся на проблеме ядерных сил.

До настоящего времени не удалось создать последовательную теорию ядерных сил. Построение этой теории является одной из центральных задач современной теоретической физики. Пока теория ядерных сил имеет полуэмпирический характер и основана на ряде опытных фактов. Совокупность имеющихся фактов позволила установить следующие свойства ядерного взаимодействия:

1. Опыты с рассеянием нейтронов на протонах показали, что на расстояниях от $1 \cdot 10^{-13}$ *см* до $2 \cdot 10^{-13}$ *см* между ядерными частицами действуют весьма мощные силы притяжения. Эти силы быстро спадают с расстоянием и не проявляются заметным образом на расстояниях, бо́льших $2 \cdot 10^{-13}$ *см*. На весьма малых расстояниях, меньших $1 \cdot 10^{-13}$ *см*, притяжение, по-видимому, заменяется отталкиванием.

2. Ядерные силы оказываются не зависящими от заряда частиц, т. е. ядерные силы, действующие между двумя протонами, нейтроном и протоном и двумя нейтронами, равны между собой. Зарядовая независимость ядерных сил вытекает как из прямых опытов по рассеянию быстрых нейтронов и протонов на протонах, так и из анализа свойств так называемых зеркальных ядер. Под зеркальными ядрами понимают ядра, отличающиеся друг от друга заменой нейтронов на протоны (зеркальными являются ядра с атомным номером $Z$ и $A - Z$, где $A$ — массовое число).

Тождественность нейтронов и протонов при ядерных взаимодействиях указывает на глубокую симметрию, существующую между этими частицами.

Неравенство масс и наличие электрического заряда у протона являются сравнительно второстепенными обстоятельствами.

Поэтому, согласно современной точке зрения, протон и нейтрон следует рассматривать как разные зарядовые состояния одной частицы — нуклона.

Нуклон имеет спин $^1/_2$ и в данном зарядовом состоянии подчиняется принципу запрета Паули. Ядерное взаимодействие между нуклонами получило название сильного взаимодействия (см. § 112).

3. Нуклон может находиться в двух различных зарядовых состояниях — протснном и нейтронном, между которыми возможны переходы.

При свободном движении протонное состояние с меньшей массой и энергией является более устойчивым. Поэтому происходит распад свободного нейтрона по схеме

$$n \to p + e + \bar{\nu},$$

где $\bar{\nu}$ — антинейтрино.

В атомных ядрах, где имеет место ядерное взаимодействие между частицами, происходит взаимное превращение нейтронов и протонов (см. ниже).

4. Наличие у протонов заряда влечет за собой два следствия: 1) протонное и нейтронное состояния являются разными состояниями нуклона. 2) Между двумя протонами наряду с ядерным взаимодействием действуют силы кулоновского отталкивания. Они становятся существенными у тяжелых ядер, обусловливая их нестабильность.

5. Ядерное взаимодействие зависит не только от расстояния, но и от взаимной ориентации спинов взаимодействующих частиц, а также от ориентации спинов относительно оси, соединяющей оба нуклона.

Зависимость ядерного взаимодействия от ориентации спинов следует непосредственно из опытов по рассеянию весьма медленных нейтронов на орто- и параводороде.

Существование зависимости от ориентации спинов относительно оси вытекает из анализа свойств дейтрона, в частности наличия у него квадрупольного момента.

6. Ядерное взаимодействие имеет обменный характер. Этот фундаментальный вывод следует, прежде всего, из самого факта стабильности ядер.

Если бы нуклонное (сильное) взаимодействие зависело только от расстояния между частицами, то потенциальная энергия системы с массовым числом $A$ была бы пропорциональна $A^2$ — числу притягивающихся пар. Между тем кинетическая энергия газа ферми-частиц, заключенных в данном объеме растет с числом частиц, согласно ((79,4), ч. III), как $A^{5/3}$.

Таким образом, при достаточно большом массовом числе потенциальная энергия оказалась бы больше кинетической и ядро должно было бы сжиматься, а частицы сливаться друг с другом. Объем ядра был бы постоянной величиной, не зависящей от $A$, а его энергия связи — пропорциональной $A^2$. В действительности данные по рассеянию показывают, что объем ядра растет пропорционально $A$, а энергия связи — также пропорциональна $A$. Это значит, что ядерные силы обладают свойством насыщения. Насыщение, как мы видели выше, является характерной особенностью обменных сил.

Остановимся несколько подробнее на изложении современных представлений о природе ядерных сил.

Из допущения о том, что протон и нейтрон являются состояниями одной частицы, и из обменного характера нуклонного взаимодействия вытекает следующая наглядная картина ядерных сил: между двумя нуклонами, находящимися на весьма малых расстояниях, происходит виртуальный обмен некоторой частицей, являющейся «переносчиком» взаимодействия. Этот обмен частицей в принципе сходен с виртуальным обменом электроном в подробно разобранном выше примере обменного взаимодействия.

Оказалось (см. ниже), что частицей, ответственной за нуклон-нуклонное взаимодействие, является $\pi$-мезон.

Именно, возможны три типа обмена:

$$p \rightleftarrows n + \pi^+,$$

$$n \rightleftarrows p + \pi^-,$$

$$\left.\begin{array}{l} p \leftrightarrows p + \pi^0, \\ n \rightleftarrows n + \pi^0. \end{array}\right\}$$

В первых двух виртуальных процессах нуклон переходит из протонного в нейтронное состояние и обратно; в последнем зарядовое состояние нуклона не изменяется. Наглядно процесс обмена заряженным мезоном можно трактовать так же, как обмен электронами: часть времени каждый из нуклонов проводит в заряженном состоянии, часть времени — в нейтральном. Обмен виртуальными $\pi$-мезонами обусловливает притяжение между нуклонами. Мы подчеркивали виртуальный характер обмена, поскольку для образования реальных мезонов потребовалась бы энергия, не меньшая чем $m_\pi c^2$, где $m_\pi$ — масса $\pi$-мезона.

Все $\pi$-мезоны — положительный, отрицательный и нейтральный — следует считать различными зарядовыми состояниями одной частицы.

Далее, оказывается, что масса $\pi$-мезонов не может быть произвольной. Ее можно связать с радиусом действия ядерных

сил. Поскольку ядерные силы не зависят от электрического заряда и имеют чисто квантовую природу, радиус действия сил может зависеть лишь от массы частиц — переносчиков $m_\pi$ и мировых постоянных $\hbar$ и $c$.

Из указанных трех величин можно составить только одну постоянную размерности длины — комптоновскую длину волны мезона

$$R \sim \frac{\hbar}{m_\pi c}. \qquad (67,10)$$

Выражению (67,10) можно придать наглядный смысл на основе следующих рассуждений: при виртуальном обмене мезоном энергия каждого из двух нуклонов должна обладать неопределенностью $\Delta E \sim m_\pi c^2$. Время обмена $\tau$ должно иметь порядок $\tau \sim \frac{\hbar}{m_\pi c^2}$. Если считать, что мезон движется со скоростью $\sim c$, то за время $\tau$ он проходит путь

$$R \sim c\tau \sim \frac{\hbar}{m_\pi c}.$$

Это расстояние и есть радиус действия ядерных сил. Задаваясь радиусом действия ядерных сил, можно найти массу частиц-переносчиков

$$m_\pi \sim \frac{\hbar}{Rc} \simeq 300 m_{эл},$$

где $m_{эл}$ — масса электрона. Это по порядку величины совпадает со значением масс $\pi$-мезонов. Заметим, что $\pi$-мезоны были обнаружены экспериментально после введения их в теорию как гипотетических частиц, ответственных за сильное ядерное взаимодействие. Наиболее убедительным доказательством того, что именно $\pi$-мезоны являются переносчиками ядерных сил, служит установленный на опыте факт чрезвычайно сильного взаимодействия $\pi$-мезонов с нуклонами.

При энергиях системы нуклонов, превышающих $m_\pi c^2$, возможно реальное возникновение $\pi$-мезонов. Оно наблюдалось как при столкновении быстрых нуклонов, так и при воздействии на нуклоны $\gamma$-лучей. Наблюдалась реакция

$$p + \gamma \rightarrow n + \pi^+,$$

представляющая элементарный акт ядерного фотоэффекта. В дальнейшем, в частности, в § 112, мы вернемся еще к проблеме ядерных сил.

ГЛАВА IX

# ПРИЛОЖЕНИЯ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ К РАССМОТРЕНИЮ СВОЙСТВ АТОМНЫХ И ЯДЕРНЫХ СИСТЕМ

## § 68. Атом гелия

Детально рассмотренный в гл. IV атом водорода является простейшей одноэлектронной системой. Переходя к изучению многоэлектронных систем, естественно обратиться прежде всего к исследованию свойств атома гелия, в котором вокруг ядра движутся два электрона. Будем предполагать, что ядро имеет бесконечно большую массу. Поэтому, считая его неподвижным, запишем гамильтониан системы из двух электронов в виде

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_1-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_2-\frac{2e^2}{r_1}-\frac{2e^2}{r_2}+\frac{e^2}{r_{12}}\right)\psi=E\psi. \qquad (68,1)$$

Здесь $\boldsymbol{r}_1$ и $\boldsymbol{r}_2$ — радиусы-векторы первого и второго электронов, $r_{12}$ — расстояние между ними. Третий и четвертый члены в (68.1) выражают потенциальную энергию электронов в поле ядра, последний член — энергию кулоновского взаимодействия между электронами.

Следует отметить, что представление гамильтониана в такой форме связано с рядом приближений. Электроны обладают магнитными моментами и их взаимодействие имеет более сложный характер, чем кулоновское взаимодействие. Далее магнитные моменты (спиновый и орбитальный) также взаимодействуют друг с другом. Мы, однако, не будем исследовать подробно эти эффекты, имеющие характер малых поправок.

Так как гамильтониан системы не содержит спиновых операторов, то решение уравнения (68.1) следует искать в виде произведения функций, одна из которых зависит только от координат, другая — от спина

$$\psi=\Phi(\boldsymbol{r}_1,\ \boldsymbol{r}_2)\,\varphi(s_{z_1},\ s_{z_2}). \qquad (68,2)$$

В § 66 было показано, что спиновая функция двух электронов является симметричной относительно перестановки местами двух частиц, если полный спин системы равен единице, и антисимметричной, если спин равен нулю. Таким образом, видно, что состояния атома гелия делятся на две группы. Состояния со спином, равным нулю, называются парасостояниями, а со спином, равным единице, — ортосостояниями. Если бы гамильтониан (68.1) точно описывал систему, то три ортосостояния, различающиеся проекцией спина на ось $z$, имели бы одинаковую энергию. Однако слабое взаимодействие между спиновым и орбитальным магнитными моментами снимает вырождение и возникают три близких подуровня. Таким образом, энергетический спектр гелия состоит из совокупности синглетных и триплетных уровней.

Из общих соображений легко установить, к какой группе состояний относится основное состояние гелия, которое, как известно, описывается волновой функцией, не имеющей узлов (см. § 10). Очевидно, что этой функцией не может быть антисимметричная координатная функция, так как последняя при $\boldsymbol{r}_1 = \boldsymbol{r}_2$ обращается в нуль.

Действительно, если $\Phi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2)$ — антисимметричная функция двух переменных $\boldsymbol{r}_1$ и $\boldsymbol{r}_2$, то она удовлетворяет соотношению

$$\Phi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2) = -\Phi(\boldsymbol{r}_2, \boldsymbol{r}_1). \tag{68,3}$$

При $\boldsymbol{r}_1 = \boldsymbol{r}_2 = \boldsymbol{r}$ мы имеем $\Phi(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}) = 0$.

Таким образом, мы видим, что в нормальном состоянии волновая функция симметрична по координатам и, следовательно, антисимметрична по спинам. Нормальное состояние гелия является парасостоянием.

В уравнении (68,1) переменные не разделяются и его точное решение получить невозможно. Поэтому для его решения разработан ряд приближенных методов. Применение теории возмущений позволяет получить волновые функции и, в довольно грубом приближении, энергию основного состояния гелия.

Именно будем считать, что взаимодействие между электронами является в уравнении (68,1) возмущением.

Тогда в нулевом приближении уравнение (68,1) можно написать в виде

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_1 - \frac{\hbar^2}{2m}\Delta_2 - \frac{2e^2}{r_1} - \frac{2e^2}{r_2}\right)\Phi_0 = E_0\Phi_0. \tag{68,4}$$

Оно решается методом разделения переменных. Для нормального состояния атома гелия имеем

$$\Phi_0 = \psi_1(\boldsymbol{r}_1)\psi_1(\boldsymbol{r}_2), \quad E_0 = 2E_1,$$

где через $E_1$ и $\psi_1$ обозначены соответственно энергия и волновая функция нормального состояния водородоподобного атома с зарядом $Z=2$. Функция $\Phi_0$, как мы указывали ранее, симметрична в координатах электронов.

Уровень энергии нормального состояния в первом приближении теории возмущений дается формулой

$$E = E_0 + E^{(1)},$$

где величина $E^{(1)}$, в соответствии с формулой (53,12), определяется матричным элементом

$$E^{(1)} = \int |\psi_1(r_1)|^2 |\psi_1(r_2)|^2 \frac{e^2}{r_{12}} dV_1 dV_2. \qquad (68,5)$$

При вычислении высших уровней энергии атома гелия решение невозмущенного волнового уравнения может быть записано в форме

$$\left.\begin{aligned} \Phi_0 &= \psi_n(r_1)\psi_m(r_2), \\ E_0 &= E_n + E_m. \end{aligned}\right\} \qquad (68,6)$$

Здесь $\psi_n$ и $\psi_m$ — волновые функции водородоподобного атома, находящегося соответственно в $n$-м и $m$-м квантовом состоянии. (Для получения качественной картины мы не будем учитывать далее вырождения по орбитальному и магнитному квантовым числам.)

Легко понять, что решением невозмущенного уравнения будет также функция

$$\left.\begin{aligned} \Phi_0 &= \psi_n(r_2)\psi_m(r_1), \\ E_0 &= E_n + E_m. \end{aligned}\right\} \qquad (68,7)$$

Таким образом, имеет место двукратное вырождение. Оба решения (68,6) и (68,7) отличаются друг от друга перестановкой электронов. Для дальнейших расчетов нам следует обратиться к теории возмущения при наличии вырождения (см. § 54).

Поправка к энергии $E_0$ в первом приближении определяется в этом случае из условия обращения в нуль определителя (см. § 54)

$$\begin{vmatrix} H'_{11} - E^{(1)} & H'_{12}, \\ H'_{21} & H'_{22} - E^{(1)} \end{vmatrix} = 0.$$

Величины $H'_{11}$, $H'_{12}$, $H'_{21}$ и $H'_{22}$ представляют собой матричные элементы

$$\left.\begin{aligned}
H'_{11} &= \int \psi_n^*(\boldsymbol{r}_1)\,\psi_m^*(\boldsymbol{r}_2)\,\frac{e^2}{r_{12}}\,\psi_n(\boldsymbol{r}_1)\,\psi_m(\boldsymbol{r}_2)\,dV_1\,dV_2,\\
H'_{22} &= \int \psi_m^*(\boldsymbol{r}_1)\,\psi_n^*(\boldsymbol{r}_2)\,\frac{e^2}{r_{12}}\,\psi_m(\boldsymbol{r}_1)\,\psi_n(\boldsymbol{r}_2)\,dV_1\,dV_2,\\
H'_{12} &= \int \psi_n^*(\boldsymbol{r}_1)\,\psi_m^*(\boldsymbol{r}_2)\,\frac{e^2}{r_{12}}\,\psi_n(\boldsymbol{r}_2)\,\psi_m(\boldsymbol{r}_1)\,dV_1\,dV_2,\\
H'_{21} &= \int \psi_m^*(\boldsymbol{r}_1)\,\psi_n^*(\boldsymbol{r}_2)\,\frac{e^2}{r_{12}}\,\psi_n(\boldsymbol{r}_1)\,\psi_m(\boldsymbol{r}_2)\,dV_1\,dV_2.
\end{aligned}\right\} \qquad (68,8)$$

Легко заметить, что $H'_{11}=H'_{22}$, $H'_{12}=H'_{21}$. Действительно, если в выражении для матричного элемента $H'_{11}$ заменить $\boldsymbol{r}_1$ на $\boldsymbol{r}_2$ и $\boldsymbol{r}_2$ на $\boldsymbol{r}_1$, то получим в точности выражение $H'_{22}$. Аналогичное утверждение относится также к матричным элементам $H'_{12}$ и $H'_{21}$. Раскрывая определитель, получаем

$$\left(H'_{11}-E^{(1)}\right)^2-H'^2_{12}=0.$$

Отсюда находим два значения для поправки к энергии:

$$E_1^{(1)}=H'_{11}+H'_{12}, \qquad (68,9)$$

$$E_2^{(1)}=H'_{11}-H'_{12}. \qquad (68,10)$$

Выражения (68,9) и (68,10) совпадают с общей формулой, найденной в § 67. Двум значениям энергии (68,9) и (68,10) соответствуют две волновые функции типа $\psi=a\psi_n(\boldsymbol{r}_1)\,\psi_m(\boldsymbol{r}_2)+$ $+\,b\psi_n(\boldsymbol{r}_2)\,\psi_m(\boldsymbol{r}_1)$. Коэффициенты $a$ и $b$ определяются из уравнений

$$\left(H'_{11}-E^{(1)}\right)a+H'_{12}b=0, \qquad H'_{21}a+\left(H'_{22}-E^{(1)}\right)b=0.$$

Для значения $E_1^{(1)}$ получаем $a=b$, а в случае $E_2^{(1)}$ имеем $a=-b$. Таким образом, под влиянием возмущения вырождение снимается, и мы получаем два различных состояния:

$$\left.\begin{aligned}
\Phi_0^{(s)} &= a_1\left[\psi_n(\boldsymbol{r}_1)\,\psi_m(\boldsymbol{r}_2)+\psi_n(\boldsymbol{r}_2)\,\psi_m(\boldsymbol{r}_1)\right],\\
\Phi_0^{(a)} &= a_2\left[\psi_n(\boldsymbol{r}_1)\,\psi_m(\boldsymbol{r}_2)-\psi_n(\boldsymbol{r}_2)\,\psi_m(\boldsymbol{r}_1)\right],
\end{aligned}\right\} \qquad (68,11)$$

где $a_1$ и $a_2$ — нормировочные константы.

Состояния $\Phi_0^{(s)}$ и $\Phi_0^{(a)}$, как это видно из формул (68,11), являются соответственно симметричными и антисимметричными в координатах электронов. В соответствии с ранее сказанным, функция $\Phi_0^{(s)}$ описывает состояние атома гелия со спином, рав-

ным нулю, а волновая функция $\Phi_0^{(a)}$ отвечает состоянию с полным спином, равным единице.

Волновая функция $\Phi_0^{(s)}$ отвечает парасостоянию со спином нуль и большей энергией $E_1^{(1)}$. Соответственно, $\Phi_0^{(a)}$ отвечает ортосостоянию со спином единица и меньшей энергией $E_2^{(1)}$.

Матричные элементы $H'_{11} = H'_{22}$, как видно из их определения, представляют кулоновский, а $H'_{12} = H'_{21}$ — обменный интеграл. К системе из двух электронов в гелии относится все сказанное в § 67. Например, если электрон 1 находится в нормальном, а электрон 2 в возбужденном состоянии, то по прошествии промежутка времени $\tau = \dfrac{\pi\hbar}{2|H'_{12}|}$ они обменяются состояниями.

Соотношения (68,9) и (68,10) не дают еще полной картины уровней атома. Действительно, в расчете, приведенном выше, не учитывалось вырождение уровней водородоподобных атомов по квантовым числам $l$. Взаимодействие между электронами снимает это вырождение, и уровни оказываются зависящими не только от главных квантовых чисел, но и от орбитальных моментов.

Отметим, что приведенный метод расчета не дает большой точности. Основной уровень энергии атома гелия, полученный по указанной теории, отличается примерно на 20% от экспериментально наблюдаемого значения. Такое сильное расхождение обусловлено выбором возмущения, которое не является достаточно малым.

## § 69. Вариационный принцип

Мы видели, что уже двухэлектронная задача — атом гелия — не может быть решена точно и требует привлечения приближенных методов.

В еще большей мере это относится к сложным атомам, содержащим много электронов. Несмотря на сложность многоэлектронных атомов, эффективные приближенные методы решения позволяют составить весьма детальное представление об их свойствах. Эффективные приближенные методы в значительной мере связаны с экстремальными свойствами уравнения Шредингера. Именно, оказывается, что уравнение Шредингера может быть получено из некоторого вариационного принципа.

Введем в рассмотрение функционал

$$I = \int \varphi^* \hat{H} \varphi \, dV, \tag{69,1}$$

где на функцию $\varphi$ накладывается ограничение

$$\int \varphi^* \varphi \, dV = 1. \tag{69,2}$$

В остальном $\varphi$ остается произвольной комплексной функцией, имеющей ту же размерность, что и собственные функции оператора $H$. Минимальное значение функционала $I$ при условии (69,2) может быть найдено по методу Лагранжа. При варьировании комплексной функции можно независимо варьировать $\varphi$ и $\varphi^*$. Для конкретности можно варьировать $\varphi^*$. Варьирование $\varphi$ приводит к тому же результату.

Имеем, очевидно,

$$\delta \int \varphi^* \hat{H} \varphi \, dV + E_0 \delta \int \varphi^* \varphi \, dV = 0,$$

где $E_0$ — множитель Лагранжа. Отсюда имеем

$$\int \delta\varphi^* (\hat{H} - E_0) \varphi \, dV = 0, \tag{69,3}$$

или ввиду произвольности $\delta\varphi^*$

$$(\hat{H} - E_0) \varphi = 0. \tag{69,4}$$

Таким образом, если $\varphi = \psi_0$, где $\psi_0$ — нормированное решение уравнения Шредингера, отвечающее собственному значению оператора $\hat{H}$, равному $E_0$, то функционал

$$I(\psi_0) = \int \psi_0^* \hat{H} \psi_0 \, dV = E_0. \tag{69,5}$$

Покажем, что $E_0$ — минимальное собственное значение $\hat{H}$, т. е. энергия нормального состояния. Пусть $\varphi = \psi_0 + \sum c_n \psi_n$. Тогда для $I$ находим

$$I = \int \left(\psi_0^* + \sum c_n^* \psi_n^*\right) \hat{H} \left(\psi_0 + \sum c_n \psi_n\right) dV = E_0 + \sum |c_n|^2 E_n > E_0. \tag{69,6}$$

Волновые функции возбужденных стационарных состояний $\psi_n$ должны удовлетворять не только условию (69,2), но и условию ортогональности

$$\int \psi_0 \psi_n \, dV = 0. \tag{69,7}$$

Они осуществляют экстремум, но не минимум $I(\psi_n)$.

Вариационные свойства уравнения Шредингера широко используются для получения приближенных его решений. Задаваясь на основании физических соображений или опытных данных видом пробной функции, ищут минимальное значение интеграла $I(\varphi)$.

Рассмотрим, в виде примера, гармонический осциллятор. Выбирая в качестве пробной функции нормированную функцию $\varphi = (2\alpha/\pi)^{1/4}e^{-\alpha x^2}$, имеем

$$I(\varphi) = \sqrt{\frac{2\alpha}{\pi}} \int e^{-\alpha x^2}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{m\omega^2 x^2}{2}\right)e^{-\alpha x^2}\,dx = \frac{\hbar^2\alpha}{2m} + \frac{m\omega^2}{8\alpha}.$$

Условие минимума дает $\alpha = (m\omega)/(2\hbar)$, откуда

$$I_{\min} = E_0 = \frac{\hbar\omega}{2} \quad \text{и} \quad \varphi_{\min} = \psi_0 = \sqrt[4]{\frac{m\omega}{\pi\hbar}}\, e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}}.$$

Удачный выбор пробной функции $\varphi$ привел нас к точному значению $E_0$ и $\psi$. Если бы мы выбрали другую пробную функцию, то было бы получено другое, хотя и близкое, значение $E_0'$ и $\psi'$. Недостатком вариационного метода является то, что он дает неопределенную, заранее не предсказуемую погрешность.

Дальнейшие примеры использования вариационного принципа будут даны в следующем параграфе.

## § 70. Метод самосогласованного поля (метод Хартри — Фока)

Для расчета многоэлектронных систем широкое применение получил метод самосогласованного поля, с которым мы уже сталкивались (см. ч. IV). Идея метода (часто именуемого методом Хартри) заключается в следующем: в нулевом приближении все электроны считаются движущимися независимо друг от друга в поле ядра. С помощью волновых функций нулевого приближения находится плотность заряда и среднее электростатическое поле, создаваемое всеми электронами.

В следующем приближении каждый из электронов считается движущимся в поле ядра и в поле, создаваемом всеми остальными электронами. Решение уравнения Шредингера в этом поле дает волновую функцию первого приближения. Вводя коррекцию в распределение заряда и поля и решая уравнение Шредингера в новом поле, можно найти поправку второго приближения и т. д.

Для получения уравнения Шредингера в самосогласованном поле воспользуемся вариационным принципом. Для сокращения записи мы проведем выкладки на примере двухэлектронной системы (атома гелия) в предположении, что каждый из электронов находится в $s$-состоянии. Мы не будем также учитывать требования симметризации волновой функции системы электронов. Это будет сделано несколько позднее. В нулевом приближении оба электрона описываются вещественными волновыми функциями $\psi$, а волновая функция атома имеет вид

$$\Psi = \psi_1(r_1)\cdot\psi_2(r_2) = \psi_1\cdot\psi_2. \tag{70,1}$$

В приближении (70,1) в вариационном принципе функции $\psi_1$ и $\psi_2$ варьируются независимо друг от друга. Аналогично (69,3) получаем

$$\left.\begin{aligned}\int \delta\psi_1\left[\int \psi_2(\hat{H}-E)\,\psi_1\psi_2\,dV_2\right]dV_1=0,\\ \int \delta\psi_2\left[\int \psi_1(\hat{H}-E)\,\psi_1\psi_2\,dV_1\right]dV_2=0.\end{aligned}\right\} \tag{70,2}$$

Ввиду произвольности вариаций

$$\left.\begin{aligned}\int \psi_2(\hat{H}-E)\,\psi_1\psi_2\,dV_2=0,\\ \int \psi_1(\hat{H}-E)\,\psi_1\psi_2\,dV_1=0.\end{aligned}\right\} \tag{70,3}$$

Подставляя значение $\hat{H}$ из (68,1), приходим к уравнениям

$$\left.\begin{aligned}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_1-\frac{2e^2}{r_1}+\left(\int \psi_2^2\frac{e^2}{r_{12}}\,dV_2\right)\right]\psi_1=E_1\psi_1,\\ \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_2-\frac{2e^2}{r_2}+\left(\int \psi_1^2\frac{e^2}{r_{12}}\,dV_1\right)\right]\psi_2=E_2\psi_2,\end{aligned}\right\} \tag{70,4}$$

где обозначено $E_1=E-H_{22}$, $E_2=E-H_{11}$,

$$H_{ii}=\int \psi_i\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\Delta_i-\frac{2e^2}{r_i}\right)\psi_i\,dV_i \qquad (i=1,\ 2).$$

Здесь, очевидно, $E$ — полная энергия системы из двух электронов в поле ядра, $E_1$ и $E_2$ — энергии каждого из электронов.

Уравнения (70,4) показывают, что в потенциальной энергии каждого из электронов появляются дополнительные слагаемые:

$$\left.\begin{aligned}g_1(r_1)=\int \frac{e^2}{r_{12}}\psi_2^2\,dV_2=e\int \frac{\rho_2(r_2)\,dV_2}{r_{12}},\\ g_2(r_2)=\int \frac{e^2}{r_{12}}\psi_1^2\,dV_1=e\int \frac{\rho_1(r_1)\,dV_1}{r_{12}}\end{aligned}\right\} \tag{70,5}$$

соответственно, где $\rho_i=e\psi_i^2$ — плотность заряда, создаваемого одним электроном в точке $r_i$.

Полная энергия системы равна

$$E=\int \Psi\hat{H}\Psi\,dV=\int \psi_1\psi_2\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_1-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_2-\frac{2e^2}{r_1}-\frac{2e^2}{r_2}+\frac{e^2}{r_{12}}\right)\times$$
$$\times\,\psi_1\psi_2\,dV_1\,dV_2=E_1+E_2-\bar{G}. \tag{70,6}$$

Величина $\overline{G}$ имеет простой смысл: это не что иное, как средняя энергия электростатического взаимодействия между электронами

$$\overline{G} = e^2 \int \frac{\psi_1^2 \psi_2^2}{r_{12}} dV_1 \, dV_2 = \int \frac{\rho_1 \rho_2}{r_{12}} dV.$$

Поскольку в каждую из величин $E_1$ и $E_2$ входит взаимодействие между электронами (ср. (70,4)) и, следовательно, в сумме $(E_1 + E_2)$ оно учитывается дважды, энергия системы получается после вычитания из $(E_1 + E_2)$ значения $\overline{G}$.

В случае системы из $N$ электронов аналогичный вывод дает для $i$-го электрона в $n$-м квантовом состоянии

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_i + U(r_i) + \sum e_i e_k \frac{|\psi_{n_k}|^2}{|\boldsymbol{r}_i - \boldsymbol{r}_k|} dV_k \right] \psi_{n_i} = E_n \psi_{n_i}. \quad (70,7)$$

Структура общего уравнения не отличается от структуры уравнений (70,4). Сложность уравнений Шредингера в приближении самосогласованного поля связана с тем, что в уравнение для $\psi_i$ входят волновые функции всех остальных электронов. Поэтому, даже в простейшем случае двухэлектронной системы, уравнения (70,4) приходится решать численными либо приближенными методами, например, вариационным. В последнем случае в качестве пробных функций естественно выбрать водородоподобные функции для некоторого эффективного заряда ядра. Значение последнего находится из условия минимума интегралов (70,2). Эти вычисления, а также сводка численных решений, могут быть найдены в книге Г. Бете и Э. Солпитера[1]).

До сих пор мы не учитывали симметрию волновой функции. Ясно, однако, что с принципиальной точки зрения симметризация волновой функции должна быть проведена с самого начала вычислений.

Например, без учета симметрии волновой функции не возникало различия в энергии орто- и парагелия.

Метод самосогласованного поля с учетом требований симметрии волновой функции носит название метода Хартри — Фока. В простейшем случае двух электронов все предыдущие выкладки могут без труда быть приведены для симметризованной волновой функции

$$\Psi(1, 2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_1(1) \psi_2(2) - \psi_2(1) \psi_1(2)].$$

---

[1]) Г. Бете и Э. Солпитер, Квантовая механика атомов с одним и двумя электронами, Физматгиз, 1960.

Подставляя это выражение в (70,2), мы должны варьировать независимо друг от друга волновые функции $\psi_1$ и $\psi_2$.

Тогда вместо (70,3) получаем

$$\sum_{i=1}^{2} \int dV_1\, \delta\psi_i(1)\, dV_2 \{\psi_k(2)(\hat{H}-E)[\psi_k(2)\psi_i(1)-\psi_i(2)\psi_k(1)]\} = 0. \tag{70,8}$$

При этом в (70,8) $i=1$ при $k=2$ и $i=2$ при $k=1$. Ввиду произвольности $\delta\psi_1$ и $\delta\psi_2$ мы приходим к двум уравнениям. После подстановки полного оператора $\hat{H}$ из (68,1) эти уравнения приобретают вид

$$\begin{aligned} &\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta - E - \frac{2e^2}{r} + H_{22} + G_{22}\right)\psi_1(r) - [H_{12}+G_{12}]\psi_2(r) = 0,\\ &\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta - E - \frac{2e^2}{r} + H_{11} + G_{11}\right)\psi_2(r) - [H_{12}+G_{12}]\psi_1(r) = 0, \end{aligned} \tag{70,9}$$

где обозначено:

$$G_{ik}(r_1) = \int \psi_i(r_2)\,\psi_k(r_2)\,\frac{e^2}{r_{12}}\,dV_2,$$

$$H_{ik} = \int \psi_i\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta - \frac{2e^2}{r}\right)\psi_k\,dV.$$

С учетом симметрии волновой функции число неизвестных волновых функций удваивается, уравнения для них образуют зацепляющую систему.

Главное отличие уравнений Хартри — Фока от уравнений Хартри заключается в появлении обменных интегралов, т. е. членов вида $G_{12}$.

В общем случае многоэлектронных атомов волновую функцию системы электронов, которую следует подставить в уравнение вариационного принципа, нужно представить в виде (65,6).

Мы не будем приводить получающихся при этом громоздких уравнений. Хотя при численном решении уравнений Хартри — Фока приходится производить весьма трудоемкие вычисления, удается с большой степенью точности энергии основных и возбужденных состояний найти распределение заряда и поля как для гелия, так и целого ряда атомов и ионов.

Естественно, что объем необходимых числовых расчетов при интегрировании уравнений Хартри — Фока быстро возрастает с увеличением числа электронов.

## § 71. Статистическая модель атома

В случае тяжелых атомов, когда расчет многоэлектронной системы по методу Хартри — Фока становится весьма трудоемким, широкое применение получил статистический метод Томаса — Ферми. Пусть в некотором сферически-симметричном поле $\varphi(r)$ движется система из большого числа электронов. В силу принципа Паули большая часть этих электронов будет находиться в состояниях с большими квантовыми числами. Если потенциал $\varphi(r)$ изменяется в пространстве достаточно медленно, то электроны можно рассматривать в квазиклассическом приближении. Если, кроме того, взаимодействие между электронами является достаточно слабым, всю совокупность электронов можно считать идеальным ферми-газом, находящимся при абсолютном нуле температуры.

В вырожденном ферми-газе (ср. § 79 ч. III) электроны попарно заполняют квантовые состояния, так что на каждую пару приходится ячейка фазового пространства объемом $(2\pi\hbar)^3$. При этом в пространстве импульсов заполнены все клетки с импульсом, лежащим в интервале $0 \leqslant p \leqslant p_{\max}$. Значение $p_{\max}$ легко выразить через плотность электронного газа $n$ (т. е. среднее число электронов в единице объема). Число электронов в единице объема с данным значением импульса равно, очевидно,

$$dn = \frac{8\pi}{(2\pi\hbar)^3}\, p^2\, dp.$$

Интегрируя от $p = 0$ до $p = p_{\max}$, имеем

$$p_{\max}^3 = \frac{3}{8\pi}(2\pi\hbar)^3 n. \tag{71,1}$$

Последняя формула позволяет выразить плотность заряда $\rho = en$ через импульс

$$\rho = \frac{8\pi e}{3(2\pi\hbar)^3}\, p_{\max}^3. \tag{71,2}$$

С другой стороны, $p_{\max}$ может быть связан с потенциалом $\varphi(r)$ с помощью следующего простого рассуждения. Энергия электрона, связанного в атоме $E$, всегда не положительна, т. е.

$$E = \frac{p^2}{2m} + e\varphi(r) \leqslant 0.$$

При этом мы считаем, что потенциал $\varphi(r)$ вне атома обращается в нуль, откуда для максимального импульса, совместимого с требованием $E = 0$, находим

$$p_{\max} = \sqrt{-2me\varphi(r)}. \tag{71,3}$$

Поэтому плотность электронного заряда связана с потенциалом соотношением

$$\rho = \frac{8\pi e}{3(2\pi\hbar)^3}(-2me)^{3/2}[\varphi(r)]^{3/2}. \tag{71,4}$$

В приближении самосогласованного поля для потенциала электростатического поля $\varphi(r)$ можно написать уравнение Пуассона

$$\Delta\varphi = -4\pi\rho$$

или, учитывая сферическую симметрию атома,

$$\frac{1}{r^2}\frac{d^2(r\varphi)}{dr^2} = -\frac{4e}{3\pi\hbar^3}(-2me)^{3/2}\varphi^{3/2}. \tag{71,5}$$

Полученное уравнение носит название уравнения Томаса — Ферми. Для получения распределения потенциала $\varphi(r)$ необходимо дополнить это уравнение граничными условиями. Рассмотрим вначале случай нейтральных атомов. Тогда одним из граничных условий является $\varphi \to 0$ при $r \to \infty$. Второе условие вытекает из требования, чтобы вблизи ядра, когда его заряд не экранирован электронами, поле было бы числом кулоновским, т. е.

$$\varphi(r) \to \frac{Ze}{r} \quad \text{при } r \to 0. \tag{71,6}$$

Для получения решения уравнения (71,5) с граничными условиями (71,3) и (71,6) удобно перейти к безразмерным величинам, определив их соотношениями

$$\chi = \frac{r\varphi}{Z|e|}, \quad x = \frac{r}{d},$$

где $d$ — постоянная величина с размерностью длины. Для $\chi$ находим уравнение

$$\frac{d^2\chi}{dx^2} = \frac{|e|^3(2m)^{3/2}Z^{1/2}d^{3/2}}{3\pi\hbar^3}\frac{\chi^{3/2}}{\sqrt{x}}.$$

Полагая $d$ равным

$$d = \frac{1}{2}\left(\frac{9\pi^2}{16}\right)^{1/3}\frac{\hbar^2}{me^2}\frac{1}{Z^{1/3}} = 0{,}88\frac{a}{Z^{1/3}}, \tag{71,7}$$

где $a$ — радиус боровской орбиты, приходим к уравнению

$$\frac{d^2\chi}{dx^2} = \frac{\chi^{3/2}}{\sqrt{x}}. \tag{71,8}$$

При этом, очевидно,

$$\left.\begin{aligned} \chi &\to 1 \quad \text{при} \quad x \to 0, \\ \chi &\to 0 \quad \text{при} \quad x \to \infty. \end{aligned}\right\} \tag{71,9}$$

Интегрирование уравнения (71,8) при граничных условиях (71,9) было проведено численно. Поскольку краевая задача не зависит от атомного номера, интегрирование этой системы позволяет найти универсальное распределение безразмерного потенциала в атоме.

На рис. 18 пунктиром изображен[1]) ход функции $\chi(x)$ для атома. Поскольку функция $\chi(x)$ при $x \to \infty$ лишь асимптотически обращается в нуль, потенциал, а с ним и электронная плотность, нигде не обращаются в нуль. Это значит, что в рассмотренном приближении нельзя найти конечное значение радиуса атома. На рис. 19 кривая радиальной электронной плотности $D = 4\pi r^2 \rho(r)$ для атома аргона по Томасу — Ферми (сплошная кривая) сравнивается с данными, найденными по методу Хартри — Фока (пунктирная кривая).

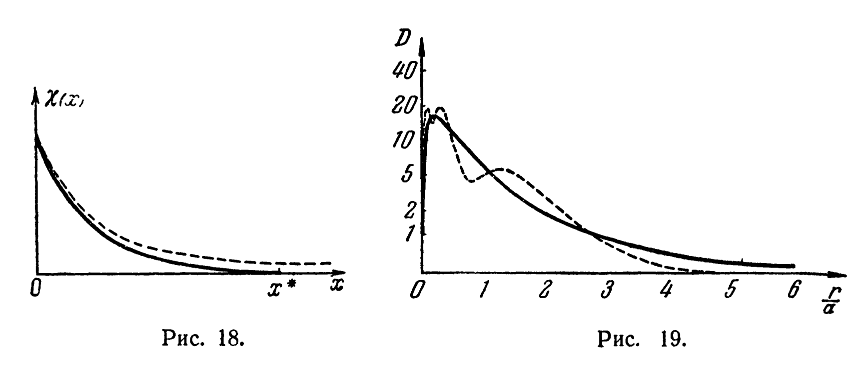



Рис. 18. Рис. 19.

Рис. 19 наглядно иллюстрирует достоинства и недостатки метода Томаса — Ферми. Он не передает всех деталей хода электронной плотности внутри атома, но позволяет достаточно точно установить общий ее ход.

Во внешних частях атома, вдали от ядра, электронная плотность, вычисленная по Томасу — Ферми, имеет завышенные значения.

То обстоятельство, что метод Томаса — Ферми дает плохие результаты для периферических областей атома, вытекает из условий его применимости (см. ниже). Числовой расчет хода электронной плотности с расстоянием от ядра показывает, что в сфере радиуса $R \simeq 1{,}33 a Z^{-1/3}$ заключена половина полного электронного заряда.

---

[1]) Табулированные значения функции $\chi(x)$ могут быть найдены в книгах: Л. Д. Ландау и Е. М. Лифшиц, Квантовая механика, Физматгиз, 1963, стр. 291; П. Гомбаш, Статистическая теория атома и ее применение, ИЛ, 1951.

Поэтому качественно можно считать величину $R$ эффективным радиусом атома. Он уменьшается с ростом $Z$.

Полная энергия всех электронов в атоме по порядку величины равна средней электростатической энергии одного электрона $\frac{Ze^2}{R} \sim \frac{Z^{4/3}e^2}{a}$, умноженной на их полное число $Z$, т. е. по порядку величины равна $\frac{e^2}{a}Z^{7/3}$. Эти средние значения, а также все величины, относящиеся к свойствам внутренних областей атомов, например структура рентгеновских уровней находятся в хорошем согласии с опытными данными.

Наоборот, величины, зависящие от свойств периферийных электронов, например потенциалы ионизации атомов, не могут быть определены по методу Томаса — Ферми достаточно удовлетворительным образом.

На периферии атома электронная плотность недостаточно велика, для того чтобы электроны можно было считать вырожденным электронным газом.

Основным достоинством метода Томаса — Ферми является его простота. В виде примера можно привести важный результат, который вытекает также из расчетов по методу Хартри — Фока, но требует в этом случае весьма громоздких выкладок. Речь идет о нахождении таких значений атомного номера $Z$, при которых начинают заполняться состояния с данным значением орбитального момента. Если электрон движется с моментом $l$ в самосогласованном поле $\varphi(r)$, то его эффективную потенциальную энергию можно представить формулой (35,18). В квазиклассическом приближении можно заменить $l(l+1)$ на $\left(l+\frac{1}{2}\right)^2$. Тогда имеем

$$U_{\text{eff}} = -|e|\varphi(r) + \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\left(l+\frac{1}{2}\right)^2}{r^2},$$

где под $\varphi(r)$ подразумевается потенциал, найденный из уравнения Томаса — Ферми. Поскольку всегда полная энергия $E$ отрицательна, полная потенциальная энергия должна быть существенно отрицательной $U_{\text{eff}} < 0$ или

$$|e|\varphi(r)r^2 > \frac{\hbar^2}{2m}\left(l+\frac{1}{2}\right)^2. \qquad (71,10)$$

Переходя к безразмерным величинам $\chi$ и $x$, имеем вместо (71,10)

$$Z^{2/3}\frac{x\chi(x)}{(3\pi/4)^{2/3}} > \left(l+\frac{1}{2}\right)^2. \qquad (71,11)$$

Величина $x\chi(x)$ ограничена и имеет пологий максимум. При больших $x$ потенциал $\chi(x)$ убывает быстрее, чем $\frac{1}{x}$, при $x \to 0$, $x\chi(x)$ также равно нулю. Поэтому неравенство (71,11) при данном $l$ выполнено лишь при достаточно большом значении $Z$. Это значит, что кривая $U_{\text{eff}}$ целиком лежит выше оси абсцисс при достаточно малом $Z$ и проходит ниже оси при достаточно большом $Z$. Состояний с $U_{\text{eff}} > 0$ быть не может. Поэтому граница реализуемых состояний определяется условием касания кривой $U_{\text{eff}}$ оси абсцисс, т. е. выполнением условий

$$U_{\text{eff}} = 0, \qquad \frac{dU_{\text{eff}}}{dr} = 0,$$

или

$$\begin{gathered} Z_{\text{кр}}^{2/3} x\chi(x) = \left(\frac{4}{3\pi}\right)^{2/3} \left(l + \frac{1}{2}\right)^2, \\ Z_{\text{кр}}^{2/3} \left[x^2\chi'(x) - x\chi(x)\right] = -2\left(\frac{4}{3\pi}\right)^{2/3} \left(l + \frac{1}{2}\right)^2. \end{gathered} \tag{71,12}$$

Каждому значению $l$ отвечает свое критическое значение заряда ядра $Z_{\text{кр}}$, при котором выполняются условия (71,12).

Из этих уравнений легко исключить $\chi'$ и $\chi$, после чего находим связь между $l$ и $Z_{\text{кр}}$:

$$Z_{\text{кр}} = 0{,}155\,(2l + 1)^3. \tag{71,13}$$

Полагая в последней формуле $l = 1, 2, 3, \ldots$ и округляя результат до ближайших целых чисел, мы находим значения $Z_{\text{кр}}$, при которых начинается заполнение состояний с указанными моментами. Эти значения соответственно:

$$Z_{\text{кр}} = 5{,}21,\ 58{,}124. \tag{71,14}$$

В § 73 будет показано, что этот результат имеет важное значение для понимания свойств сложных атомов.

Другим важным приложением метода Томаса — Ферми является изучение свойств положительных ионов.

В этом случае можно ожидать, что из-за преобладающего заряда ядра электронная оболочка будет сжата и электронная плотность будет спадать настолько быстро, что можно ввести конечный радиус электронной оболочки $R^*$. Вне иона при $r > R^*$ должно существовать электрическое поле с потенциалом

$$\varphi = \frac{|e|\,Z(1-\sigma)}{r}, \quad r > R^*,$$

где величина $\sigma = \frac{|\text{заряд оболочки}|}{\text{заряд ядра}}$ именуется степенью ионизации.

При $r = R^*$ потенциал равен

$$\varphi_0 = \frac{Z\,|e|\,(1-\sigma)}{R^*}.$$

Соответственно, энергия электрона на поверхности иона равна $(e\varphi_0)$.

Условие того, что электрон является связанным в ионе, приобретает вид

$$E = \frac{p^2}{2m} + e\varphi \leqslant e\varphi_0$$

вместо $E \leqslant 0$ для нейтрального атома. Соответственно, максимальный импульс $p_{\text{макс}} = \sqrt{2me}\,(\varphi_0 - \varphi)^{1/2}$, и уравнение (71,5) для иона приобретает вид

$$\frac{1}{r}\frac{d^2(r\varphi)}{dr^2} = -\frac{4e\,(2me)^{3/2}\,(\varphi_0-\varphi)^{3/2}}{3\pi\hbar^3}.$$

Его интегрирование с учетом граничного условия на поверхности иона $\varphi = \varphi_0$ и условия (71,6) произведено, как и для атома, численно. Кривая $\chi(x)$ для иона изображена на рис. 18 сплошной линией. Кривая $\chi(x)$ пересекает ось абсцисс в точке $x^* = \frac{R^*}{d}$, где $R^*$ определяется условием

$$4\pi \int_0^{R^*} \rho r^2\,dr = -Ze\sigma.$$

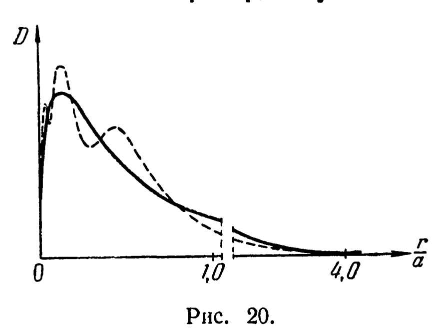



Рис. 20.

На рис. 20 приведено распределение радиальной электронной плотности для иона $Rb^+$, рассчитанное по методу Томаса — Ферми и по Хартри (пунктирная кривая). Мы видим, что в периферической части иона совпадение между кривыми несколько лучшее, чем у атома.

Границы применимости метода Томаса — Ферми существенно связаны с границами применимости квазиклассического приближения. Формула (39,23) после подстановки в нее выражений $U = e\varphi = Ze^2/r$, $p \simeq p_{\text{макс}} = \sqrt{2me\varphi}$ дает в качестве критерия применимости метода Томаса — Ферми условие

$$r \gg \hbar^2/(Ze^2m) \sim a/Z.$$

На больших расстояниях $r \sim a$ квазиклассическое приближение снова становится неприменимым. Таким образом, метод Томаса — Ферми применим при $r$, лежащих в интервале

$$a/Z \ll r \ll a. \qquad (71,15)$$

## § 72. Квантовые числа, характеризующие состояния электронов в атомах

Перейдем теперь к обсуждению свойств многоэлектронных атомов. Очевидно, в многоэлектронном атоме — системе, состоящей из ядра и нескольких электронов, — должны выполняться законы сохранения полной энергии, полного момента количества движения и проекции момента количества движения на произвольную ось. По аналогии с теорией атома водорода можно ввести квантовые числа, определяющие значения сохраняющихся величин. На первый взгляд кажется, что квантовые числа должны характеризовать всю систему в целом, так как ни энергия, ни момент количества движения отдельного электрона, вообще говоря, не сохраняются. Однако метод самосогласованного поля позволяет рассматривать электроны как независимые частицы (волновая функция системы является произведением волновых функций отдельных частиц), находящиеся во внешнем поле. Каждый из электронов движется в самосогласованном сферически-симметричном поле ядра и остальных электронов. Так как при движении в сферически-симметричном поле сохраняется энергия, момент количества движения и его проекция, то не только атом как целое, но и отдельный электрон может характеризоваться квантовыми числами $n$, $l$, $m$. Самосогласованное поле атома не является кулоновским полем, поэтому уровни энергии будут зависеть не только от $n$, но и от $l$. Естественно, что энергия электрона не зависит от ориентации его механического момента в пространстве и, следовательно, не может зависеть от квантового числа $m$.

Таким образом, мы видим, что для характеристики состояния атома нужно указать состояние каждого атомного электрона. Состояния с моментом $l = 0, 1, 2, 3, \ldots$ обозначаются соответственно через $s$, $p$, $d$, $f$ и т. д. Главное квантовое число указывается в виде цифры, стоящей впереди. Например, обозначение $5f$ указывает, что в данном состоянии электрон характеризуется квантовым числом $n = 5$ и имеет орбитальный момент $l = 3$. Если несколько электронов находится в состоянии с одинаковыми числами $n$ и $l$, то для простоты их число указывается в виде показателя степени. Например, нормальное состояние азота характеризуется формулой $1s^2$, $2s^2$, $2p^3$. Это означает, что два электрона имеют квантовые числа $n = 1$, $l = 0$; два других находятся в состоянии $n = 2$; $l = 0$ и, наконец, три электрона —

в $2p$-состоянии. Однако таких сведений оказывается недостаточно для полного описания состояния атома, так как мы не знаем при этом, как складываются орбитальные и спиновые моменты отдельных электронов и каков полный момент атома.

Мы уже говорили о том, что полный момент атома сохраняется во времени и тем самым может служить характеристикой стационарных состояний. Кроме того, можно считать (отвлекаясь от слабого спин-орбитального взаимодействия), что сохраняется полный спин системы и полный орбитальный момент в отдельности. Эти три величины и выбираются как характеристики всей системы в целом.

Обозначения для состояний атомов с различными полными моментами $L$ вводятся по аналогии с обозначениями для отдельных электронов. Именно, при $L = 0$ состояние называется $S$-состоянием, при $L = 1$ — $P$-состоянием, при $L = 2$ — $D$-состоянием, при $L = 3$ — $F$-состоянием и т. д. Величина $J$ полного момента указывается в виде индекса справа снизу при символе орбитального момента. Например, $P_{3/2}$ обозначает, что атом находится в состоянии с орбитальным моментом $L = 1$, и полным моментом $J = 3/2$. Обычно для характеристики атома указывается также величина, равная $2S + 1$, где $S$ — полный спин атома. Это значение $2S + 1$ помещается в виде индекса слева сверху от $L$. Величина $2S + 1$ при $L \geqslant S$ указывает число близко расположенных уровней атома, составляющих его тонкую структуру. Действительно, из правила сложения моментов следует, что если $L \geqslant S$, то при сложении орбитального момента и спинового момента в полный момент системы может возникнуть всего $2S + 1$ различных состояний.

Оказывается, что эти $(2S + 1)$ состояния имеют близкие, но различные энергии. Иными словами, $(2S + 1)$ уровней образуют так называемый мультиплет. Различие в энергиях компонент мультиплета связано с так называемым спин-орбитальным взаимодействием. Под спин-орбитальным взаимодействием понимают взаимодействие, зависящее от взаимной ориентации векторов орбитального и спинового моментов.

В § 118 будет показано, что релятивистское уравнение для электрона (уравнение Дирака) позволяет вычислить спин-орбитальное взаимодействие.

Если, однако, принять сам факт существования этого взаимодействия, т. е. допустить, что ориентация векторов орбитального и спинового моментов не являются независимыми, то из весьма общих соображений можно установить закон взаимодействия. Оператор спин-орбитального взаимодействия должен быть скаляром, восставленным из векторов $\boldsymbol{L}$ и $\boldsymbol{S}$. Таким скаляром является величина $\boldsymbol{LS}$. При этом для средней энергии

спин-орбитального взаимодействия получаем

$$E_{S-L} = A\overline{\mathbf{LS}},$$

где коэффициент $A$ может быть как положительным, так и отрицательным. Имеем

$$\hat{\mathbf{J}}^2 = (\hat{\mathbf{L}} + \hat{\mathbf{S}})^2 = \hat{\mathbf{L}}^2 + \hat{\mathbf{S}}^2 + 2(\hat{\mathbf{L}}\tilde{\mathbf{S}}),$$

откуда

$$E_{S-L} = A'[J(J+1) - L(L+1) - S(S+1)].$$

Для уровней, принадлежащих к данному мультиплету, величины $L$ имеют одно и то же значение.

Если величина $A' > 0$, то самым низким уровнем в мультиплете является уровень с наименьшим возможным значением $J$ (т. е. $J = |L - S|$). Это так называемые нормальные мультиплеты. Этот случай реализуется у тех атомов, у которых незаполненная оболочка заполнена больше, чем наполовину. В противном случае оказывается, что $A' < 0$. Это так называемые обращенные мультиплеты, у которых низший уровень имеет наибольший полный момент $J$ (т. е. $J = L + S$).

Абсолютная величина мультиплетного расщепления пропорциональна $Z^2$ и быстро увеличивается по мере перехода к тяжелым атомам.

Таким образом, для полного описания состояния атома необходимо указать состояния отдельных электронов, а также числа $S$, $L$ и $J$.

Часто бывает важно знать полное число возможных состояний атома, если заданы квантовые числа $n$ и $l$ каждого электрона.

Для этой цели вначале удобно ввести понятие эквивалентных электронов, которое было впервые введено Паули.

Эквивалентными электронами называются такие электроны, которые имеют одинаковые квантовые числа $n$ и $l$.

В случае, если электроны не эквивалентны, подсчет возможных термов чрезвычайно прост.

Рассмотрим в качестве примера два электрона, находящихся в состоянии с $n = 3$, $l = 2$ и $n = 2$, $l = 1$. На основании правила сложения моментов орбитальный момент этой системы может принимать значения $L = 1, 2, 3$, а полный спин системы — два значения $S = 0, 1$. Таким образом, мы имеем термы $^1P$; $^3P$; $^1D$; $^3D$; $^1F$; $^3F$. Если электроны эквивалентны, то при подсчете возможных термов следует учитывать принцип Паули, и это несколько усложняет расчеты. Рассмотрим вначале следующий простой пример. Пусть два электрона находятся в состоянии $n_1 = n_2$ и $l_1 = 0$, $l_2 = 0$. В этом случае проекции моментов на ось также равны нулю, т. е. $m_1 = 0$, $m_2 = 0$. В соответствии

с принципом Паули, $s_{z_1}$ и $s_{z_2}$ должны иметь разные знаки. Следовательно, можем иметь, например, $s_{z_1}=\frac{1}{2}$, $s_{z_2}=-\frac{1}{2}$. В соответствии с принципом тождественности $s_{z_1}=-\frac{1}{2}$; $s_{z_2}=\frac{1}{2}$ представляет то же самое состояние.

Состояния $s_{z_1}=\frac{1}{2}$ и $s_{z_2}=\frac{1}{2}$ запрещены принципом Паули. Поэтому может реализоваться только терм $^1S$. Терм $^3S$ является запрещенным. Этот расчет показывает, что у Не, а также Be, Mg и Са и других аналогичных элементов не может быть основного триплетного уровня. Мы заметим здесь, что исторически Паули пришел к своему принципу запрета, исследуя атомные спектры. Принцип запрета возник в результате необходимости объяснить отсутствие ряда термов.

Для дальнейшего нам потребуется еще один пример. Пусть система из двух электронов имеет следующие квантовые числа $n_1=n_2$; $l_1=l_2=1$. В этом случае каждый электрон может находиться в следующих состояниях:

$$1)\ m=1,\ s_z=\frac{1}{2};\ 2)\ m=0,\ s_z=\frac{1}{2};\ 3)\ m=-1,\ s_z=\frac{1}{2};$$

$$4)\ m=+1,\ s_z=-\frac{1}{2};\ 5)\ m=0,\ s_z=-\frac{1}{2};\ 6)\ m=-1,\ s_z=-\frac{1}{2}.$$

При подсчете возможных состояний всей системы следует комбинировать друг с другом только различные состояния отдельных электронов. Это нужно делать для того, чтобы не нарушить принцип Паули. В соответствии с правилом сложения моментов получаем следующие возможные состояния с $M_z=m_1+m_2$; $S_z=s_{z_1}+s_{z_2}$:

$$1)\ M_z=2,\ S_z=0;\ 2)\ M_z=1,\ S_z=1;\ 3)\ M_z=1,\ S_z=0;$$

$$4)\ M_z=0,\ S_z=0;\ 5)\ M_z=0,\ S_z=0;\ 6)\ M_z=0,\ S_z=1;$$

$$7)\ M_z=1,\ S_z=0;\ 8)\ M_z=0,\ S_z=0.$$

Здесь не выписаны аналогичные состояния, имеющие отрицательные значения проекций $M_z$.

При анализе результатов следует начинать с состояния с наибольшей проекцией $M_z$. В данном случае имеем состояние с $M_z=2$, $S_z=0$. Отсюда мы заключаем, что должен иметься $^1D$ терм (которому отвечают также состояния с $M_z=1$, $S_z=0$; $M_z=0$, $S_z=0$).

После исключения из таблицы указанных состояний, идущих под номерами 1, 3, 4, опять выбираем состояние с наибольшей проекцией $M_z$. В данном случае $M_z=1$, $S_z=1$. Этому состоянию соответствует терм $^3P$ (которому отвечают также состояния,

отмеченные номерами 2, 6, 3, 4). Наконец, в таблице остается только состояние $M_z = 0$, $S_z = 0$, соответствующее терму $^1S$.

Таким образом, мы видим, что система из двух эквивалентных электронов с $l_1 = 1$, $l_2 = 1$ может находиться в состояниях $^1D$, $^3P$ и $^1S$. При подсчете состояний в более сложных случаях следует поступать аналогично.

Обсудим теперь общие закономерности расположения уровней энергий атома. Если электроны находятся в состоянии с определенными числами $n$ и $l$ (говорят, что в таких случаях задана электронная конфигурация), то такому распределению может соответствовать несколько различных энергетических уровней, различающихся как полным орбитальным моментом, так и полным спином системы.

С учетом мультиплетного расщепления состояние атома оказывается зависящим от величин $J$, $L$ и $S$.

Состояние атома как целого, именуемое атомным термом, определяется этими величинами. Символ терма представляют в виде $^{2S+1}L_J$. Например, нормальный терм атома азота $\left(L = 0,\ S = \frac{3}{2},\ J = \frac{3}{2}\right)$ записывают как $^4S_{3/2}$.

Порядок расположения уровней при данной электронной конфигурации был установлен из расчетов, проведенных по методу Хартри — Фока (хотя исторически он был установлен значительно раньше Хундом).

Оказалось, что из всех термов данной конфигурации наименьшей энергией обладает терм с наибольшим значением полного спина $S$.

При данном $S$ наименьшую энергию имеет терм с наибольшим значением $L$.

В приведенном только что примере термов $^1D$, $^1S$ и $^3P$ порядок расположения термов по возрастающим энергиям будет $^3P$, $^1D$ и $^1S$. Что же касается порядка расположения уровней в пределах данного мультиплета, то оказывается, что если число эквивалентных электронов в атоме или ионе меньше, чем половина от полного числа электронов, то в таком атоме мультиплеты имеют нормальную структуру. В атомах и ионах, у которых число эквивалентных электронов больше или равно половине от полного числа электронов, мультиплеты будут обращенными. Например, у атома кислорода из восьми атомов четыре находятся в $2p$-состоянии (структура $2p^4$) и являются эквивалентными. Поэтому у атома кислорода мультиплеты являются обращенными. У иона кислорода $O^{--}$ имеется два электрона в $2p$-состоянии (конфигурация $2p^2$) и мультиплеты имеют нормальную структуру.

Перейдем теперь к другому примеру. В атоме кислорода электроны находятся в состоянии $2p^4$. В соответствии со сформулированным правилом, спектр обращенный. У дважды

ионизованного кислорода электронная структура имеет вид $2p^2$. В этом случае имеем нормальную структуру мультиплетов.

Введем теперь понятие оболочки атома. Под оболочкой мы будем понимать совокупность всех электронных состояний с заданным значением квантовых чисел $n$ и $l$. Если все состояния с квантовыми числами $n$ и $l$ заняты, то соответствующая оболочка заполнена. Известно, что при заданном $n$ и $l$ имеется всего $(2l+1)$ различных состояний, различающихся квантовыми числами $m$. Если учесть также спин, то полное число электронов, необходимое для того, чтобы заполнить оболочку, будет равно $2(2l+1)$. Если оболочка заполнена, то полный спин системы, а также проекции орбитального момента должны равняться нулю. В этом случае $S=0$, $L=0$, $J=0$. Это можно показать, учитывая принцип Паули и помня, что в целиком заполненной оболочке заняты все возможные состояния как с положительными, так и отрицательными проекциями момента на ось $z$. Заполненной оболочке отвечает терм ${}^1S_0$.

Подчеркнем, что наши предыдущие рассмотрения базировались на предположении, что орбитальные моменты электронов складывались в полный орбитальный момент системы, а спиновые моменты электронов складывались в полный спиновый момент системы. Такое предположение соответствует утверждению, что взаимодействие между спином и орбитальным движением электронов значительно слабее, чем взаимодействие между спинами. При этом можно говорить о приближенном сохранении полного орбитального момента и полного спина системы. Такой вид взаимодействия носит название нормальной, $L-S$, или рассел-саундеровской связи. На основе предположения о нормальном типе связи оказывается возможным провести систематику низших уровней энергии большинства атомов. Отклонения от нормального типа связи наблюдаются в седьмой и восьмой группах периодической системы элементов.

Принципиально возможен также другой предельный вид связи, обычно именуемый $j-j$ типом связи. При $j-j$-связи орбитальный момент и спиновый момент каждого электрона складываются в полный момент $j$ отдельного электрона (орбитальный момент отдельного электрона в этом случае не сохраняется). В свою очередь полные моменты отдельных электронов складываются в полный момент атома $J$. В чистом виде такая связь в атомах не встречается.

Приведем несколько примеров различных модификаций основных видов связи в атомах. Если один электрон находится в сильно возбужденном состоянии и, следовательно, расположен достаточно далеко от ядра и остальных электронов атома, то поведение такого электрона можно считать независимым от атомного остатка. В этом случае полный момент отдельного

электрона можно считать сохраняющимся независимо от полного момента атомного остатка.

Рассмотрим другой пример. При достаточно большом заряде $Z$ атома внутренние электроны находятся под сильным влиянием заряда ядра и относительно слабо взаимодействуют с периферийными атомными электронами. Отсюда видно, что приближенно внутренние электроны можно считать не взаимодействующими (полный момент такого электрона сохраняется). В этом случае можно говорить о $j-j$-связи. Заметим, что такие электроны следует характеризовать не квантовыми числами $n$ и $l$, а квантовыми числами $n$ и $j$.

Для дальнейшего покажем, что электрический дипольный момент атома

$$\boldsymbol{d}=\sum_{i=1}^{N}\int e_i\boldsymbol{r}_i\,|\psi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2, \ldots, \boldsymbol{r}_i, \ldots, \boldsymbol{r}_n)|^2\,dV_1dV_2\ldots dV_n, \quad (72{,}1)$$

находящегося в стационарном состоянии с определенной четностью равен нулю. Действительно, так как оператор четности коммутирует с гамильтонианом, то волновая функция $\psi$ является собственной функцией оператора четности. Иными словами, она удовлетворяет соотношению

$$\psi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2, \ldots, \boldsymbol{r}_n)=-\psi(-\boldsymbol{r}_1, -\boldsymbol{r}_2, \ldots, -\boldsymbol{r}_n)$$

или

$$\psi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2, \ldots, \boldsymbol{r}_n)=\psi(-\boldsymbol{r}_1, -\boldsymbol{r}_2, \ldots, -\boldsymbol{r}_n).$$

В обоих случаях функция $|\psi|^2$ является четной функцией. Очевидно теперь, что подынтегральная функция в (72,1) нечетна и, следовательно, дипольный момент атома равен нулю.

## § 73. Периодическая система элементов

Одним из наиболее эффективных результатов, полученных с помощью квантовой теории, явилось в свое время теоретическое построение периодической системы элементов Менделеева, выполненное Бором в 1922 г.

В основу построения периодической системы элементов положены три допущения:

1) структура атомов определяется атомным номером $Z$ (зарядом ядра). Изотопы данного элемента обладают одинаковой структурой;

2) по мере возрастания атомного номера и увеличения числа электронов в атоме электроны заполняют состояния с наименьшей возможной энергией;

3) заполнение энергетических состояний ограничено принципом Паули.

В предыдущем параграфе мы ввели понятия оболочки атома, т. е. число состояний электрона в атоме с данными значениями главного и орбитального квантовых чисел $n$ и $l$ при произвольных значениях квантовых чисел $m$ и $s_z$.

Именно, число электронов в оболочке оказалось равным $2(2l+1)$. Поскольку энергия электрона в атоме зависит только от квантовых чисел $n$ и $l$ все $2(2l+1)$ электрона в данной оболочке имеют одну и ту же энергию (если отвлечься от спин-орбитального взаимодействия, которое обычно оказывается достаточно слабым).

Совокупность оболочек с фиксированным главным квантовым числом $n$ называется группой или слоем. Число электронов, заполняющих слой, равно

$$2\sum_{l=0}^{n-1}(2l+1)=2n^2.$$

Каждый слой обозначается буквами, заимствованными из классификации, принятой в рентгеновской спектроскопии. Именно, приняты обозначения:

| $n$ | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 |
|---|---|---|---|---|---|
| Символ слоя . . . . . . . . . | $K$ | $L$ | $M$ | $N$ | $O$ |
| Возможное число электронов в слое . . . . . . . . . . . | 2 | 8 | 18 | 32 | 50 |

В отличие от водородного атома в других атомных системах, энергия состояний определяется как главным квантовым числом $n$, так и орбитальным числом $l$. Зависимость энергии от $n$ является, вообще говоря, более резкой, чем от $l$. Это значит, что состояния с данным значением $n$ при всех значениях $l$ лежат ниже, чем состояния с квантовым числом $(n+1)$. Последовательность энергетических состояний имеет вид

$$1s,\ 2s,\ 2p,\ 3s,\ 3p,\ \ldots$$

Однако при переходе к $d$- и особенно к $f$-состояниям ситуация изменяется. При больших значениях момента зависимость энергии от орбитального квантового числа $l$ оказывается существенной.

Эффективная потенциальная энергия электронов слагается из энергии в кулоновском поле ядра, экранированного электронами, и центробежной энергии. Экранированный потенциал ядра убывает на больших расстояниях существенно быстрее,

чем по закону Кулона, и даже быстрее, чем центробежный потенциал.

Сравнение полной эффективной энергии электронов с малым $l$ ($s$- и $p$-состояния) и большим моментом ($d$- и $f$-состояния) показывает, что между ними имеется существенное различие. Именно, кривая $U_{\text{eff}}$ для $l=2$ и 3 проходит левее, чем у состояний с $l=0$ и 1.

Благодаря этому минимум энергии $d$- и $f$-состояний лежит ближе к ядру, чем $s$- и $p$-состояний. Это означает, что в среднем $d$- и особенно $f$-электроны движутся ближе к ядру, в более глубоких частях оболочки, чем $s$- и $p$-электроны. Часто $d$- и $f$-электроны называют проникающими. Это общее свойство состояний с большими моментами приводит к тому, что $3d$-электроны движутся в среднем ближе к ядру, чем $4s$-электроны.

С другой стороны, энергия в экранированном поле растет с ростом момента. Опыт и расчеты по методу Хартри — Фока показывают, что энергия $4s$-состояния лежит ниже энергии $3d$-состояния. Поэтому порядок заполнения состояний, лежащих за $3p$, оказывается таким:

$$4s,\ 3d,\ 4p,\ 5s,\ 4d,\ 5p,\ 6s,\ 4f,\ 5d,\ 6p,\ 7s,\ 5f.$$

Элементы, в которых заполняются $3d$ и особенно $4f$ и $5f$-оболочки, обладают особыми свойствами. Поскольку движение в состояниях с большими моментами в некулоновском поле происходит ближе к ядру, добавление электронов в $d$- и особенно в $f$-оболочку не изменяет те свойства атомов, которые зависят от периферических электронов.

Разберем более подробно порядок заполнения состояний. Это позволит выяснить, какие свойства атомов должны обнаруживать периодический, а какие монотонный ход с увеличением атомного номера $Z$.

Первым элементом периодической системы является водород. Его нормальный терм $^2S_{1/2}$.

У следующего элемента — гелия, имеющего два электрона, заполняется $K$-слой. Легко найти, что в соответствии с правилами, разобранными в предыдущем параграфе, нормальный терм гелия $^1S_0$.

У следующего элемента, лития, начинается застройка $L$-слоя. Третий электрон лития попадает в $2s$-состояние.

При расчете нормального терма можно не учитывать электронов заполненного слоя: их спиновый, орбитальный и полный моменты равны нулю.

Основной терм лития определяется единственным электроном $L$-слоя. Литий находится в состоянии $^2S_{1/2}$.

У бериллия четвертый электрон заполняет $2s$-оболочку. Основной терм бериллия, как и у гелия, $^1S_0$.

Пятый электрон бора попадает в $2p$-состояние. Таким образом, у атома бора имеется следующее распределение электронов по состояниям: $1s^2$, $2s^2$, $2p$. Поскольку оболочки $1s$ и $2s$ заполнены, легко найти основной терм атома бора. Он будет $^2P_{1/2}$.

В случае углерода шесть электронов распределены по состояниям так: $1s^2$, $2s^2$, $2p^2$. Для того чтобы определить основной терм углерода, обратимся к разобранному в § 72 примеру определения термов для двух эквивалентных $p$-электронов. Используя правило Хунда, мы видим, что основным термом углерода будет $^3P$. В этом случае атом содержит менее половины всех возможных эквивалентных $p$-электронов. Поэтому мультиплетная структура нижнего уровня будет соответствовать минимальному $J$, в данном случае $J=0$. Таким образом, окончательно, для основного терма имеем выражение $^3P_0$.

Дальнейший порядок заполнения термов нормальных состояний показан в таблице. Мы видим, что у неона застраивается $L$-слой и он, подобно гелию, не содержит электронов в незаполненных слоях и оболочках.

Заполненные слои естественно отождествить с периодами системы элементов Менделеева. Каждый период начинает заполняться одним электроном в $s$-состоянии и заканчивается, когда образуется заполненный слой.

Первый период периодической системы элементов содержит элементы, у которых заполняется $K$-слой. В него входят два элемента ($n=1$, $l=0$). Во второй период входят элементы с заполняющимся $L$-слоем. Он содержит 8 элементов ($n=2$, $l=0, 1$) от лития до неона. От натрия и до аргона заполняются $3s$- и $3p$-состояния $M$-слоя. При этом образуются периоды в периодической системе Менделеева, заканчивающиеся благородными газами He, Ne, Ar. В следующем периоде, начинающимся с калия и оканчивающимся криптоном, имеется отступление от простых правил последовательного заполнения. Именно, как мы видели в § 71, у элемента с $Z=21$ должны возникать электроны с моментом $l=2$, т. е. в $d$-состоянии. Поэтому у Sc прибавляющийся в двадцать первый электрон попадает не в $4p$-, а $3d$-состояние, застройка которого происходит от Sc до Ni. Интересно отметить, что у Cr тенденция к заполнению $3d$-состояния так сильна, что один из электронов $4s$- переходит в $3d$-состояние. После Ni вновь начинается заполнение $4s$- и $4p$-состояний. Четвертый период системы элементов заканчивается на криптоне.

После криптона идет дальнейшая простая застройка $N$-слоя, т. е. пятого периода, содержащего 18 элементов вплоть до Xe.

**Распределение электронов в периодической системе элементов**

| Элемент | | K | L | | M | | | N | | Основной терм | Ионизационный потенциал (в электронвольтах) |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| | | 1s | 2s | 2p | 3s | 3p | 3d | 4s | 4p | | |
| H | 1 | 1 | — | — | — | — | — | — | — | $^2S_{1/2}$ | 13,595 |
| He | 2 | 2 | — | — | — | — | — | — | — | $^1S_0$ | 24,58 |
| Li | 3 | 2 | 1 | — | — | — | — | — | — | $^2S_{1/2}$ | 5,39 |
| Be | 4 | 2 | 2 | — | — | — | — | — | — | $^1S_0$ | 9,32 |
| B | 5 | 2 | 2 | 1 | — | — | — | — | — | $^2P_{1/2}$ | 8,30 |
| C | 6 | 2 | 2 | 2 | — | — | — | — | — | $^3P_0$ | 11,26 |
| N | 7 | 2 | 2 | 3 | — | — | — | — | — | $^4S_{3/2}$ | 14,53 |
| O | 8 | 2 | 2 | 4 | — | — | — | — | — | $^3P_2$ | 13,61 |
| F | 9 | 2 | 2 | 5 | — | — | — | — | — | $^2P_{3/2}$ | 17,42 |
| Ne | 10 | 2 | 2 | 6 | — | — | — | — | — | $^1S_0$ | 21,56 |
| Na | 11 | Конфигурация неона | | | 1 | — | — | — | — | $^2S_{1/2}$ | 5,14 |
| Mg | 12 | | | | 2 | — | — | — | — | $^1S_0$ | 7,64 |
| Al | 13 | | | | 2 | 1 | — | — | — | $^2P_{1/2}$ | 5,98 |
| Si | 14 | | | | 2 | 2 | — | — | — | $^3P_0$ | 8,15 |
| P | 15 | | | | 2 | 3 | — | — | — | $^4S_{3/2}$ | 10,48 |
| S | 16 | | | | 2 | 4 | — | — | — | $^3P_2$ | 10,36 |
| Cl | 17 | | | | 2 | 5 | — | — | — | $^2P_{3/2}$ | 13,01 |
| Ar | 18 | | | | 2 | 6 | — | — | — | $^1S_0$ | 15,76 |
| K | 19 | Конфигурация аргона | | | | | — | 1 | — | $^2S_{1/2}$ | 4,34 |
| Ca | 20 | | | | | | — | 2 | — | $^1S_0$ | 6,11 |
| Sc | 21 | | | | | | 1 | 2 | — | $^2D_{3/2}$ | 6,54 |
| Ti | 22 | | | | | | 2 | 2 | — | $^3F_2$ | 6,82 |
| V | 23 | | | | | | 3 | 2 | — | $^4F_{3/2}$ | 6,74 |
| Cr | 24 | | | | | | 5 | 1 | — | $^7S_3$ | 6,76 |
| Mn | 25 | | | | | | 5 | 2 | — | $^6S_{5/2}$ | 7,43 |
| Fe | 26 | | | | | | 6 | 2 | — | $^5D_4$ | 7,90 |
| Co | 27 | | | | | | 7 | 2 | — | $^4F_{9/2}$ | 7,86 |
| Ni | 28 | | | | | | 8 | 2 | — | $^3F_4$ | 7,63 |
| Cu | 29 | | | | | | 10 | 1 | — | $^2S_{1/2}$ | 7,72 |
| Zn | 30 | | | | | | 10 | 2 | — | $^1S_0$ | 9,39 |
| Ga | 31 | | | | | | 10 | 2 | 1 | $^2P_{1/2}$ | 6,00 |
| Ge | 32 | | | | | | 10 | 2 | 2 | $^3P_0$ | 7,88 |
| As | 33 | | | | | | 10 | 2 | 3 | $^4S_{3/2}$ | 9,81 |
| Se | 34 | | | | | | 10 | 2 | 4 | $^3P_2$ | 9,75 |
| Br | 35 | | | | | | 10 | 2 | 5 | $^2P_{3/2}$ | 11,84 |
| Kr | 36 | | | | | | 10 | 2 | 6 | $^1S_0$ | 14,00 |

*Продолжение*

| Элемент | | Конфигурация внутренних слоев | N | | O | | | P | Основной терм | Ионизационный потенциал (в электрон-вольтах) |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| | | | 4*d* | 4*f* | 5*s* | 5*p* | 5*d* | 6*s* | | |
| Rb | 37 | Конфигурация криптона | — | — | 1 | — | — | — | $^2S_{1/2}$ | 4,19 |
| Sr | 38 | | — | — | 2 | — | — | — | $^1S_0$ | 5,69 |
| Y | 39 | | 1 | — | 2 | — | — | — | $^2D_{3/2}$ | 6,38 |
| Zr | 40 | | 2 | — | 2 | — | — | — | $^3F_2$ | 6,84 |
| Nb | 41 | | 4 | — | 1 | — | — | — | $^6D_{1/2}$ | 6,88 |
| Mo | 42 | | 5 | — | 1 | — | — | — | $^7S_3$ | 7,10 |
| Tc | 43 | | 5 | — | 2 | — | — | — | $^6S_{5/2}$ | 7,28 |
| Ru | 44 | | 7 | — | 1 | — | — | — | $^5F_5$ | 7,36 |
| Rh | 45 | | 8 | — | 1 | — | — | — | $^4F_{9/2}$ | 7,46 |
| Pd | 46 | | 10 | — | — | — | — | — | $^1S_0$ | 8,33 |
| Ag | 47 | Конфигурация палладия | | — | 1 | — | — | — | $^2S_{1/2}$ | 7,57 |
| Cd | 48 | | | — | 2 | — | — | — | $^1S_0$ | 8,99 |
| In | 49 | | | — | 2 | 1 | — | — | $^2P_{1/2}$ | 5,78 |
| Sn | 50 | | | — | 2 | 2 | — | — | $^3P_0$ | 7,34 |
| Sb | 51 | | | — | 2 | 3 | — | — | $^4S_{3/2}$ | 8,64 |
| Te | 52 | | | — | 2 | 4 | — | — | $^3P_2$ | 9,01 |
| J | 53 | | | — | 2 | 5 | — | — | $^2P_{3/2}$ | 10,45 |
| Xe | 54 | | | — | 2 | 6 | — | — | $^1S_0$ | 12,13 |
| Cs | 55 | Слои от 1*s* до 4*d* содержат 46 электронов | | — | Слои 5*s* и 5*p* содержат 8 электронов | | — | 1 | $^2S_{1/2}$ | 3,89 |
| Ba | 56 | | | — | | | — | 2 | $^1S_0$ | 5,21 |
| La | 57 | | | — | | | 1 | 2 | $^2D_{3/2}$ | 5,61 |
| Ce | 58 | | | 2 | | | — | 2 | $^3H_4$ | 6,91 |
| Pr | 59 | | | 3 | | | — | 2 | $^4I_{9/2}$ | 5,76 |
| Nd | 60 | | | 4 | | | — | 2 | $^5I_4$ | 6,31 |
| Pm | 61 | | | 5 | | | — | 2 | $^6H_{5/2}$ | 6,30 |
| Sm | 62 | | | 6 | | | — | 2 | $^7F_0$ | 5,10 |
| Eu | 63 | | | 7 | | | — | 2 | $^8S_{7/2}$ | 5,67 |
| Gd | 64 | | | 7 | | | 1 | 2 | $^9D_2$ | 11,40 |
| Tb | 65 | | | 8 | | | 1 | 2 | $^8H_{17/2}$ | 6,74 |
| Dy | 66 | | | 10 | | | — | 2 | $^5I_8$ | 6,82 |
| Ho | 67 | | | 11 | | | — | 2 | $^4I_{15/2}$ | 6,90 |
| Er | 68 | | | 12 | | | — | 2 | $^3H_6$ | 6,90 |
| Tu | 69 | | | 13 | | | — | 2 | $^2F_{7/2}$ | 6,90 |
| Yb | 70 | | | 14 | | | — | 2 | $^1S_0$ | 6,20 |
| Lu | 71 | | | 14 | | | 1 | 2 | $^2D_{3/2}$ | 5,00 |

*Продолжение*

| Элемент | | Конфигурация внутренних слоев | O | | P | | | Q | Основной терм | Ионизационный потенциал (в электрон-вольтах) |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| | | | 5$d$ | 5$f$ | 6$s$ | 6$p$ | 6$d$ | 7$s$ | | |
| Nf | 72 | Слои от 1$s$ до 5$p$ содержат 68 электронов | 2 | — | 2 | — | — | — | $^3F_2$ | 7,00 |
| Ta | 73 | | 3 | — | 2 | — | — | — | $^4F_{3/2}$ | 7,88 |
| W | 74 | | 4 | — | 2 | — | — | — | $^5D_0$ | 7,98 |
| Re | 75 | | 5 | — | 2 | — | — | — | $^6S_{5/2}$ | 7,87 |
| Os | 76 | | 6 | — | 2 | — | — | — | $^5D_4$ | 8,70 |
| Ir | 77 | | 7 | — | 2 | — | — | — | $^4F_{1/2}$ | 9,00 |
| Pt | 78 | | 9 | — | 1 | — | — | — | $^3D_3$ | 9,00 |
| Au | 79 | Слои от 1$s$ до 5$d$ содержат 78 электронов | | — | 1 | — | — | — | $^2S_{1/2}$ | 9,22 |
| Hg | 80 | | | — | 2 | — | — | — | $^1S_0$ | 10,44 |
| Tl | 81 | | | — | 2 | 1 | — | — | $^2P_{1/2}$ | 6,11 |
| Pb | 82 | | | — | 2 | 2 | — | — | $^3P_0$ | 7,42 |
| Bi | 83 | | | — | 2 | 3 | — | — | $^4S_{3/2}$ | 7,29 |
| Po | 84 | | | — | 2 | 4 | — | — | $^3P_2$ | 8,43 |
| At | 85 | | | — | 2 | 5 | — | — | $^2P_{3/2}$ | 9,40 |
| Rn | 86 | | | — | 2 | 6 | — | — | $^1S_0$ | 10,75 |
| Fr | 87 | Слои от 1$s$ до 5$d$ содержат 78 электронов | | — | 2 | 6 | — | 1 | $^2S_{1/2}$ | 4,00 |
| Ra | 88 | | | — | 2 | 6 | — | 2 | $^1S_0$ | 5,28 |
| Ac | 89 | | | — | 2 | 6 | 1 | 2 | $^2D_{3/2}$ | 5,5 |
| Th | 90 | | | — | 2 | 6 | 2 | 2 | $^3F_2$ | 5,7 |
| Pa | 91 | | | 2 | 2 | 6 | 1 | 2 | $^4K_{11/2}$ | 5,7 |
| U | 92 | | | 3 | 2 | 6 | 1 | 2 | $^5L_6$ | 4,0 |
| Np | 93 | | | 4 | 2 | 6 | 1 | 2 | $^6L_{11/2}$ | |
| Pu | 94 | | | 6 | 2 | 6 | — | 2 | $^7F_0$ | |
| Am | 95 | | | 7 | 2 | 6 | — | 2 | $^8S_{7/2}$ | |
| Cm | 96 | | | 7 | 2 | 6 | 1 | 2 | $^9D_2$ | |
| Bk | 97 | | | 8 | 2 | 6 | 1 | 2 | $^8H_{17/2}$ | |
| Cf | 98 | | | 10 | 2 | 6 | — | 2 | $^5I_8$ | |
| Es | 99 | | | 11 | 2 | 6 | — | 2 | $^4I_{15/2}$ | |
| Fm | 100 | | | 12 | 2 | 6 | — | 2 | $^3H_6$ | |
| Md | 101 | | | 13 | 2 | 6 | — | 2 | $^2F_{7/2}$ | |
| No | 102 | | | 14 | 2 | 6 | — | 2 | $^1S_0$ | |
| Lw | 103 | | | 14 | 2 | 6 | 1 | 2 | $^2D_{1/2}$ | |
| Ku | 104 | | | 14 | 2 | 6 | 2 | 2 | $^3F_2$ | |

В следующем, шестом периоде, содержащем 32 элемента, происходит заполнение $6s$-, $4f$-, $6p$-состояний. Здесь вновь имеют место более сложный порядок заполнения. У Се ($Z = 58$) электроны начинают заполнение $4f$-состояния. Напомним, что согласно расчету в приближении Томаса — Ферми электроны с $l = 3$ должны появляться начиная с элемента $Z = 55$.

Застройка седьмого периода у элементов, существующих в естественном состоянии, остается незавершенной. Начиная с Ра, происходит заполнение глубокого $5f$-состояния. До настоящего времени искусственно созданы элементы от Np до Ku.

Во всех этих элементах, именуемых актинидами, происходит заполнение $5f$-состояния.

По мере увеличения атомного номера $Z$ все свойства атомов, определяющиеся внутренними электронами, обнаруживают монотонные изменения. В виде примера можно указать характеристические рентгеновские спектры. Характеристическое рентгеновское излучение возникает при заполнении вакантного места в одной из внутренних оболочек. Рентгеновский спектр имеет, очевидно, характер, сходный с водородным, но с постоянной Ридберга, умноженной на $Z^2$. Частота испускаемых линий растет пропорционально $Z^2$ (закон Мозли).

Напротив, все свойства атомов, определяемые периферическими электронами, с ростом $Z$ имеют периодический ход. К ним принадлежит, например, ионизационный потенциал атома (см. табл.). Ионизационный потенциал имеет наименьшее значение у первого элемента периода и достигает наибольшего значения у последнего элемента.

Другим свойством, обнаруживающим периодичность, является атомный объем. Наибольшим объемом обладают атомы щелочных металлов, у которых имеется один электрон за пределами заполненного слоя.

С точки зрения химии наиболее важной характеристикой атома является его валентность. В химической связи участвуют только непарные электроны. Электроны, находящиеся в заполненных состояниях и имеющие суммарный спин, равный нулю, в химическом взаимодействии не участвуют.

Отсюда следует, что химическое взаимодействие и его качественная характеристика — валентность — определяются исключительно числом неспаренных электронов, находящихся в незаполненных состояниях. Числовое значение валентности атома в данном состоянии равно $r = 2S$, где $S$ — спин атома в этом состоянии.

Мы особенно подчеркиваем, что валентность атома связана с его состоянием по той причине, что атом, переходя из одного состояния в другое, может изменять свою валентность.

В § 79 мы обсудим этот вопрос несколько подробнее, здесь же мы ограничимся одним замечанием: если первый возбужденный терм лежит близко к основному, атом может вступать в химическую связь в возбужденном состоянии. Из сказанного вытекает, что элементы первой группы периодической системы, с которых начинаются все 7 периодов, находящиеся в ${}^2S_{1/2}$ состоянии, имеют валентность $r = 1$.

Элементы второй группы, находящиеся в ${}^1S_0$ состоянии, имеют нулевую валентность. Они были бы химически неактивны, если бы у них близко к основному состоянию не был расположен возбужденный терм. В возбужденном состоянии два внешних электрона имеют конфигурацию $s$ и $p$, так что атом имеет полный спин 1 и валентность $r = 2$. У атомов третьей группы вне заполненных оболочек имеется три электрона. Их конфигурация $s^2p$ отвечает суммарному спину $S = \frac{1}{2}$ и валентности единица. Однако эти атомы с малой энергией возбуждения могут переходить в состояние с конфигурацией $sp^2$ и спином $S = \frac{3}{2}$. В возбужденном состоянии их валентность $r = 3$. Элементы первых трех групп в химическом отношении являются металлами. Как известно, с химической точки зрения металлы характеризуются способностью отдавать электроны, вступая в химические соединения ионного типа.

Элементы четвертой группы вступают в химическую связь в нормальном и возбужденном состояниях с конфигурациями $s^2p^2$ и $sp^3$. Соответствующие значения спина и валентности равны соответственно $S = 1$, $r = 2$ и $S = 2$, $r = 4$.

Возбужденное состояние отвечает конфигурации $s^2p^2s$ и переходу пятого электрона в $s$-состояние следующего слоя (т. е. переход с увеличением главного квантового числа на единицу). Спин и валентность в возбужденном состоянии равны соответственно $S = \frac{5}{2}$ и $r = 5$.

В шестой группе атомы находятся в нормальном состоянии с конфигурацией $s^2p^4$ со спином $S = 1$. Их валентность $r = 2$. При возбуждении один из электронов переходит из $p$-состояния в $s$-состояние следующего слоя. В этом возбужденном состоянии $r = 4$.

Наряду с этим типом возбуждения часто реализуются возбуждения с переходом двух электронов в следующий слой, одного из $s$-, а второго из $p$-состояния. В этом возбужденном состоянии атом шестивалентен.

У атомов седьмой группы нормальная конфигурация есть $s^2p^5$. Спин $S = \frac{1}{2}$ и валентность $r = 1$. Однако возможны

переходы одного, двух и трех электронов в следующий слой. Поэтому реализуются также валентности $r=3$, $r=5$ и $r=7$.

Элементы четвертой, пятой, шестой и седьмой групп, стоящие в начале группы, являются неметаллами. В соединениях ионного типа они приобретают электроны (являются окислителями), имея тенденцию к образованию заполненного состояния.

Особыми химическими свойствами обладают элементы промежуточных групп — железа, палладия и платины, а также лантаниды (редкие земли) и актиниды.

В атомах группы железа, лантанидов и актинидов происходит достройка глубоких $d$- и $f$-состояний. $d$- и $f$-электроны не участвуют обычно в валентных связях и валентность атомов определяется электронами внешних состояний. Однако это отнюдь не строгий закон, так как в некоторых случаях при образовании химических соединений электроны из глубоких состояний переходят во внешние и начинают участвовать в валентности. Особенно отчетливо это проявляется у некоторых актинидов. Поэтому химические свойства элементов с особыми свойствами групп довольно сложны.

Мы видим, таким образом, что возможно не только теоретическое обоснование расположения атомов в периодической системе элементов, но также и сравнительно детальное предсказание их химических свойств.

## § 74. Эффект Зеемана

Мы видели в § 31 ч. I, что полная теория эффекта Зеемана не могла быть построена на основе классической электродинамики. Анализируя обширный опытный материал, Ланде правильно подобрал величину, количественно определяющую характеристики эффекта Зеемана. Эта величина в настоящее время называется множителем Ланде.

Квантовая теория эффекта Зеемана позволяет без каких-либо новых допущений найти значение множителя Ланде и характер зеемановского расщепления. Рассмотрим, как изменяется положение уровней энергии атома, если его поместить во внешнее магнитное поле, постоянное во времени. Волновую функцию $\psi$ для стационарных состояний атома, как обычно, можно написать в виде

$$\psi(\boldsymbol{r}_i,\ t) = \varphi(\boldsymbol{r}_i)\, e^{-\frac{iEt}{\hbar}}. \tag{74,1}$$

При подстановке (74,1) в уравнение Паули (63,11) последнее преобразуется к виду

$$\left\{\frac{1}{2m}\sum_i \hat{\boldsymbol{p}}_i^2 + \frac{|e|}{2mc}(\hat{\boldsymbol{L}} + 2\hat{\boldsymbol{S}})\mathscr{H} + \frac{e^2}{8mc^2}\sum_i [\mathscr{H}\boldsymbol{r}_i]^2 + U\right\}\psi = E\psi, \tag{74,2}$$

где $U$ учитывает взаимодействие электронов между собой и электронов с ядрами. Предположим, что напряженность внешнего магнитного поля достаточно мала, так что в (74,2) можно опустить слагаемое, содержащее квадрат поля.

Введем величину $H'$, равную

$$\hat{H}' = \frac{|e|}{2mc}(\hat{\boldsymbol{L}} + 2\hat{\boldsymbol{S}})\,\mathscr{H} = -\frac{e}{2mc}(\hat{\boldsymbol{J}} + \hat{\boldsymbol{S}})\,\mathscr{H}, \qquad (74,3)$$

где $\hat{\boldsymbol{J}}$ — оператор полного момента, $\hat{H}'$ является малым возмущением, действующим на атом.

Гамильтониан $\hat{H}$ тогда можно записать в виде

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}'; \qquad \hat{H}_0 = \frac{1}{2m}\sum_i \hat{\boldsymbol{p}}_i^2 + U. \qquad (74,4)$$

В невозмущенном состоянии атом характеризуется определенным полным моментом системы $J$ и определенной проекцией полного момента $M_z$ на ось $z$. Очевидно, следует применить теорию возмущений для вырожденных состояний. Действительно, энергия невозмущенного состояния не зависит от величины проекции полного момента $M_z$ на ось $z$. Так как оператор возмущения представляет собой проекцию некоторого вектора на ось $z$ и приводится к диагональному виду одновременно с оператором проекции полного момента на эту же ось, то следует вычислить лишь диагональные элементы от оператора возмущений

$$H' = \frac{|e|\,\mathscr{H}}{2mc}(\hat{J}_z + \hat{S}_z). \qquad (74,5)$$

Диагональный матричный элемент берется по квантовым числам полного момента $J$ и проекции момента $M_z \equiv M$ количества движения на ось $z$.

Диагональный матричный элемент оператора $\hat{J}_z$ равен

$$(\hat{J}_z)_{JM;\,JM} = \hbar M. \qquad (74,6)$$

Следовательно, нам надо определить выражение

$$(\hat{S}_z)_{JM;\,JM} = \overline{S}_z.$$

Обычно значение $\overline{S}_z$ находят из наглядных, но не вполне строгих соображений, связанных с прецессией вектора $\boldsymbol{S}$ относительно вектора $\boldsymbol{J}$ [1]). Мы приведем более строгое, но громоздкое вычисление матричного элемента. Оно может служить хорошим примером практического использования матричного метода.

---

[1]) См. Л. Д. Ландау и Е. М. Лифшиц, Квантовая механика, Физматгиз, 1963, стр. 497.

Заметим вначале, что в соответствии с определением оператор $\hat{J}$ равен $\hat{\boldsymbol{J}}=\hat{\boldsymbol{L}}+\hat{\boldsymbol{S}}$. Операторы $\hat{\boldsymbol{L}}$ и $\hat{\boldsymbol{S}}$ коммутируют между собой, так как они действуют на разные переменные.

Зная правила коммутации $\hat{L}_x$, $\hat{L}_y$, $\hat{L}_z$; $\hat{S}_x$, $\hat{S}_y$, $\hat{S}_z$, легко найдем следующие соотношения:

$$\{\hat{J}_x, \hat{S}_x\}=0, \qquad \{\hat{J}_x, \hat{S}_y\}=i\hbar\hat{S}_z, \qquad \{\hat{J}_x, \hat{S}_z\}=-i\hbar\hat{S}_y.$$

Другие правила коммутаций могут быть получены циклической перестановкой. Тогда получаем

$$\left.\begin{aligned} &\{\hat{J}_y, \hat{S}_y\}=0, \quad \{\hat{J}_y, \hat{S}_z\}=i\hbar\hat{S}_x, \quad \{\hat{J}_y, \hat{S}_x\}=-i\hbar\hat{S}_z, \\ &\{\hat{J}_z, \hat{S}_z\}=0, \quad \{\hat{J}_z, \hat{S}_y\}=-i\hbar\hat{S}_x, \quad \{\hat{J}_z, \hat{S}_x\}=i\hbar\hat{S}_y. \end{aligned}\right\} \qquad (74,7)$$

Из этих правил вытекает соотношение

$$(\hat{J}_x+i\hat{J}_y)(\hat{S}_x+i\hat{S}_y)-(\hat{S}_x+i\hat{S}_y)(\hat{J}_x+i\hat{J}_y)=0. \qquad (74,8)$$

Вычислим следующий матричный элемент от правой и левой частей найденного соотношения:

$$[(\hat{J}_x+i\hat{J}_y)(\hat{S}_x+i\hat{S}_y)]_{J,\,M+1;\,J,\,M-1}=[(\hat{S}_x+i\hat{S}_y)(\hat{J}_x+i\hat{J}_y)]_{J,\,M+1;\,J,\,M-1}.$$

В соответствии с формулой (51,14) матричный элемент от оператора $\hat{J}_x+i\hat{J}_y$ отличен от нуля только в случае перехода $J,\,M\rightarrow J,\,M-1$. Поэтому

$$(\hat{J}_x+i\hat{J}_y)_{JM;\,JM-1}=\hbar\sqrt{(J+M)(J-M+1)}. \qquad (74,9)$$

Тогда, пользуясь правилом умножения для матриц (45,6), получаем

$$(\hat{J}_x+i\hat{J}_y)_{M+1;\,M}(\hat{S}_x+i\hat{S}_y)_{M;\,M-1}-\\ -(\hat{S}_x+i\hat{S}_y)_{M+1;\,M}(\hat{J}_x+i\hat{J}_y)_{M;\,M-1}=0. \qquad (74,10)$$

В этих формулах мы всюду опустили индекс $J$. Пользуясь соотношением (74,9), находим

$$\frac{(\hat{S}_x+i\hat{S}_y)_{M+1;\,M}}{\sqrt{(J+M+1)(J-M)}}=\frac{(\hat{S}_x+i\hat{S}_y)_{M;\,M-1}}{\sqrt{(J+M)(J-M+1)}}\equiv A.$$

Аналогично можно получить

$$\frac{(\hat{S}_x+i\hat{S}_y)_{M+2;\,M+1}}{\sqrt{(J+M+2)(J-M-1)}}=A.$$

Отсюда мы видим, что величина $A$ не зависит от $M$, следовательно, имеем

$$(\hat{S}_x+i\hat{S}_y)_{M;\,M-1}=A\sqrt{(J+M)(J-M+1)}. \qquad (74,11)$$

Матричные элементы от нужного нам оператора $\hat{S}_z$, можно найти, используя следующую формулу:

$$(\hat{J}_x - i\hat{J}_y)(\hat{S}_x + i\hat{S}_y) - (\hat{S}_x + i\hat{S}_y)(\hat{J}_x - i\hat{J}_y) = -2\hbar\hat{S}_z. \quad (74,12)$$

Вычисляя диагональный матричный элемент от соотношения (74,12), получим в результате:

$$(\hat{J}_x - i\hat{J}_y)_{M;\,M+1}(\hat{S}_x + i\hat{S}_y)_{M+1;\,M} - (\hat{S}_x + i\hat{S}_y)_{M;\,M-1}(\hat{J}_x - i\hat{J}_y)_{M-1;\,M} = -2\hbar(\hat{S}_z)_{M;\,M}.$$

Используя (74,11), а также зная, что

$$(\hat{J}_x - i\hat{J}_y)_{M;\,M+1} = \hbar\sqrt{(J+M+1)(J-M)},$$

легко определить диагональный элемент $(\hat{S}_z)_{M;\,M}$, который равен

$$\left.\begin{aligned} -2(\hat{S}_z)_{M;\,M} &= (J+M+1)(J-M)A - (J+M)(J-M+1)A = -2AM, \\ (\hat{S}_z)_{M;\,M} &= AM. \end{aligned}\right\} \quad (74,13)$$

Перейдем теперь к нахождению величины $A$. Из соотношения

$$\hat{\boldsymbol{J}}^2 = (\hat{\boldsymbol{L}} + \hat{\boldsymbol{S}})^2 = \hat{\boldsymbol{L}}^2 + 2(\hat{\boldsymbol{L}}\hat{\boldsymbol{S}}) + \hat{\boldsymbol{S}}^2 = \hat{\boldsymbol{L}}^2 + 2(\hat{\boldsymbol{J}}\hat{\boldsymbol{S}}) - \hat{\boldsymbol{S}}^2$$

немедленно следует

$$(\hat{\boldsymbol{J}}\hat{\boldsymbol{S}}) = \frac{\hat{\boldsymbol{J}}^2 + \hat{\boldsymbol{S}}^2 - \hat{\boldsymbol{L}}^2}{2}.$$

Для рассел-саундеровского типа связи диагональный матричный элемент от скалярного произведения $(\hat{\boldsymbol{J}}\hat{\boldsymbol{S}})$ равен

$$(\hat{\boldsymbol{J}}\hat{\boldsymbol{S}})_{JM;\,JM} = \hbar^2\frac{J(J+1) - L(L+1) + S(S+1)}{2}. \quad (74,14)$$

С другой стороны, матричный элемент может быть найден, если скалярное выражение $(\hat{\boldsymbol{J}}\hat{\boldsymbol{S}})$ преобразовать к виду

$$(\hat{\boldsymbol{J}}\hat{\boldsymbol{S}})_J = \frac{1}{2}(\hat{S}_x + i\hat{S}_y)(\hat{J}_x - i\hat{J}_y) + \frac{1}{2}(\hat{S}_x - i\hat{S}_y)(\hat{J}_x + i\hat{J}_y) + \hat{J}_z\hat{S}_z. \quad (74,15)$$

Найдем диагональный матричный элемент от правой и левой частей соотношения (74,15), тогда имеем:

$$(\hat{\boldsymbol{J}}\hat{\boldsymbol{S}})_{M;\,M} = \frac{1}{2}(\hat{S}_x + i\hat{S}_y)_{M;\,M-1}(\hat{J}_x - i\hat{J}_y)_{M-1;\,M} + \frac{1}{2}(\hat{S}_x - i\hat{S}_y)_{M;\,M+1}(\hat{J}_x + i\hat{J}_y)_{M+1;\,M} + \hbar M(\hat{S}_z)_{M;\,M}. \quad (74,16)$$

Нам нужно найти теперь матричный элемент $(\hat{S}_x - i\hat{S}_y)_{M;\,M+1}$. Это легко сделать с помощью соотношения (74,11). Заметим

предварительно, что константа $A$ действительна. Это видно из формулы (74,13), в которой все величины, определяющие величину $A$, действительны.

Выполнив комплексное сопряжение правой и левой частей соотношения

$$(\hat{S}_x + i\hat{S}_y)_{M+1;\,M} = A\sqrt{(J+M+1)(J-M)},$$

получим

$$(\hat{S}_x)^*_{M+1;\,M} - i(\hat{S}_y)^*_{M+1;\,M} = A\sqrt{(J+M+1)(J-M)}.$$

Используя эрмитовость операторов, находим

$$(\hat{S}_x)^*_{M+1;\,M} - i(\hat{S}_y)^*_{M+1;\,M} = (\hat{S}_x)_{M;\,M+1} - i(\hat{S}_y)_{M;\,M+1} =$$
$$= (\hat{S}_x - i\hat{S}_y)_{M;\,M+1} = A\sqrt{(J+M+1)(J-M)}. \quad (74,17)$$

Подставляя в соотношение (74,16) значения $(\hat{J}\hat{S})_{M;\,M}$ и $(\hat{S}_x + i\hat{S}_y)_{M;\,M-1}$ в соответствии с формулами (74,14) и (74,11), а также используя (74,17) и (74,13), находим величину $A$:

$$A = \hbar\,\frac{J(J+1)+S(S+1)-L(L+1)}{2J(J+1)}. \quad (74,18)$$

Используя найденное значение для $A$, а также формулу (74,13), получаем диагональный матричный элемент $(\hat{S}_z)_{JM;\,JM}$, который имеет вид

$$(\hat{S}_z)_{JM;\,JM} = \hbar M\,\frac{J(J+1)+S(S+1)-L(L+1)}{2J(J+1)}. \quad (74,19)$$

Поправка к уровням энергии атома, обусловленная магнитным полем $\mathscr{H}$, дается выражением

$$\Delta E = \frac{|e|\,\mathscr{H}\hbar M}{2mc}\left(1 + \frac{J(J+1)+S(S+1)-L(L+1)}{2J(J+1)}\right) \equiv \frac{|e|\,\mathscr{H}\hbar M}{2mc}\,g. \quad (74,20)$$

Множитель $g$ называется множителем Ланде.

Для синглетных уровней $J = L$, $S = 0$ имеем:

$$\Delta E = \frac{|e|\,\mathscr{H}\hbar M}{2mc}. \quad (74,21)$$

Прежде чем перейти к обсуждению формул (74,20) и (74,21), установим границы применимости рассмотренного вывода.

Невозмущенное уравнение Паули

$$\hat{H}_0\psi = E\psi;\ \ \hat{H}_0 = \frac{1}{2m}\sum_i \hat{p}_i^2 + U$$

определяет уровни энергии атома, включая также его мультиплетную структуру. Таким образом, чтобы изложенная выше теория возмущения была применима, необходимо, чтобы матричный элемент от возмущения (74,3) был меньше, чем расстояние между уровнями соответствующей тонкой структуры атома.

Также следует указать, что при расчетах предполагалось, что в атоме осуществляется рассел-саундеровский тип связи (т. е. что во времени сохраняется как величина $J$, так и $L$ и $S$).

Перейдем теперь к обсуждению полученных формул, определяющих эффект Зеемана. Из формулы (74,20) видно, что каждая компонента мультиплета расщепляется на $2J+1$ уровней. Действительно, при заданном $J$ проекция полного момента $M$ может принимать $2J+1$ различных значений. В соответствии со сказанным в § 54 возмущение, имеющее симметрию, отличную от невозмущенного гамильтониана, снимает вырождение. Относительно расположения вновь возникших термов можно сказать следующее.

Если $J$ — целое число, то на месте расщепившегося уровня в магнитном поле возникает уровень, соответствующий значению $M=0$. Оставшиеся $2J$ уровней располагаются по $J$ уровней вверху и $J$ уровней внизу на равных расстояниях от основной линии с $M=0$. Если $J$ — полуцелое, то уровни также располагаются симметрично относительно старого положения подвергшегося расщеплению уровня, причем ближайшие уровни расположены от первоначального положения на расстоянии

$$\frac{|e|\hbar\mathscr{H}}{4mc}g.$$

Заметим еще, что если осуществляется $j-j$-связь, то характер эффекта Зеемана сильно меняется. Эта связь встречается в чистом виде редко, и мы не будем проводить здесь соответствующие расчеты.

## § 75. Эффект Пашена — Бака и диамагнетизм атомов

В сильных магнитных полях характер эффекта Зеемана изменяется. Именно, при возрастании напряженности магнитного поля расстояние между мультиплетами увеличивается. В очень сильных полях расщепление уровня так велико, что расстояния между компонентами возникшего в поле мультиплета оказываются большими по сравнению с расстояниями между компонентами естественной мультиплетной структуры. Напомним, что последняя возникает вследствие спин-орбитального взаимодействия. В этом случае формула (74,20) уже более неприменима, а характер спектра изменяется. Это изменение спектра в сильном магнитном поле носит название эффекта Пашена — Бака.

Мы проведем расчет в том случае, когда расщепление, обусловленное магнитным полем, велико по сравнению с расстоянием между уровнями естественного мультиплета. Это означает, что приобретаемая в магнитном поле энергия велика по сравнению со спин-орбитальным взаимодействием. Тогда в невозмущенный гамильтониан $H_0$ в формуле (74,4) можно не включать член, учитывающий спин-орбитальное взаимодействие. Поэтому невозмущенные состояния атомов можно характеризовать как полным моментом $J$, так и проекциями орбитального момента $L_z$ и спинового момента $S_z$ на ось $z$.

Оператор возмущения по-прежнему имеет вид

$$\hat{H}' = \frac{|e|\hbar}{2mc}(\hat{J}_z + \hat{S}_z)\mathscr{H} = \frac{e\hbar}{2mc}(\hat{L}_z + 2\hat{S}_z)\mathscr{H}. \qquad (75,1)$$

Поправка к энергии равна среднему значению оператора $H'$ по состояниям с определенными проекциями орбитального и спинового моментов, т. е.

$$E' = \frac{|e|\hbar\mathscr{H}}{2mc}(\overline{L_z} + 2\overline{S_z}) = \frac{|e|\hbar\mathscr{H}}{2mc}(L_z + 2S_z). \qquad (75,2)$$

Формула (75,2) определяет тонкую структуру спектра в сильных магнитных полях.

Рассмотрим теперь влияние отброшенного квадратичного по магнитному полю члена в формуле (74,2). Учет этой величины особенно существен для термов с $L = S = 0$. В этом случае расщепления уровней за счет линейного члена по $\mathscr{H}$ не происходит. Это можно заметить из общей формулы (74,20). В этом случае поправкой, обусловленной квадратичным членом, пренебрегать нельзя. За оператор возмущения, в соответствии с формулой (74,2), следует взять

$$\hat{H}_1' = \frac{e^2}{8mc^2}\sum_i [\mathscr{H}\boldsymbol{r}_i]^2. \qquad (75,3)$$

Суммирование по $i$ соответствует суммированию по всем электронам атома.

Поправка к уровням энергии, обусловленная оператором $\hat{H}_1'$ опять определяется диагональным матричным элементом

$$E_2' = \frac{e^2}{8mc^2}\overline{\sum_i [\mathscr{H}\boldsymbol{r}_i]^2} = \frac{e^2}{8mc^2}\sum_i \overline{(\mathscr{H}r_i \sin\theta)^2}.$$

При вычислении $\overline{[\mathscr{H}\boldsymbol{r}]^2}$ следует помнить, что волновая функция системы $L = 0$, $S = 0$ сферически-симметрична, поэтому

$$\overline{\sin^2\theta} = 1 - \overline{\cos^2\theta} = \frac{2}{3}.$$

Таким образом, для сдвига уровней получаем

$$\Delta E = \frac{e^2\mathscr{H}^2}{12mc^2}\sum_i \overline{r_i^2}. \qquad (75,4)$$

Так как магнитный момент атома можно вычислить с помощью формулы $\boldsymbol{M} = -\frac{\partial \Delta E}{\partial \boldsymbol{\mathscr{H}}}$ (ср. (41,1) ч. IV), то мы получаем

$$\boldsymbol{M} = \chi\boldsymbol{\mathscr{H}};\ \chi = -\frac{e^2}{6mc^2}\sum_i \overline{r_i^2}. \qquad (75,5)$$

Таким образом, атомы обладают диамагнитной восприимчивостью. Поскольку последняя определяется в основном средним квадратичным расстоянием всех электронов от ядра, то $\sum_i \overline{r_i^2}$ возрастает, хотя $\bar{r}_i^2$ с ростом $Z$ уменьшается. Поэтому $\chi$ особенно велико у многоэлектронных атомов. Для многоэлектронных атомов хорошие результаты дает применение метода Томаса — Ферми. Поэтому диамагнитные восприимчивости часто рассчитывают по этому методу.

С другой стороны, измерения $\chi$ представляют один из лучших способов нахождения эффективных размеров атомов. Подчеркнем, что все атомы и ионы имеют диамагнитную восприимчивость. Однако у некоторых ионов парамагнитная восприимчивость, связанная со спиновым магнитным моментом, превышает диамагнитную.

## § 76. Теория дейтона

В теории ядра дейтон, состоящий из протона и нейтрона, играет ту же роль, какую в теории атома играет водород.

Ядерное взаимодействие между протоном и нейтроном может зависеть от расстояния между ними $r$ и взаимной ориентации спинов обеих частиц $\boldsymbol{s}_1$ и $\boldsymbol{s}_2$. Явный вид потенциальной энергии ядерного взаимодействия в настоящее время неизвестен. Поэтому приходится ограничиваться написанием самого общего выражения для оператора потенциальной энергии, зависящего от $\boldsymbol{r}$, $\boldsymbol{s}_1$ и $\boldsymbol{s}_2$. Оператор взаимодействия не должен изменяться при повороте системы координат. Кроме того, как показывает опыт, в ядерных силах имеет место закон сохранения четности (см. § 33). Это означает, что оператор взаимодействия не должен изменяться при отражении координат (оператор взаимодействия должен коммутировать с оператором четности). Таким образом, нам необходимо составить всевозможные скаляры из трех векторов $\boldsymbol{r}$; $\boldsymbol{s}_1$ и $\boldsymbol{s}_2$. Величинами, не меняющимися при повороте системы координат, являются следующие скаляры: $(\boldsymbol{s}_1\boldsymbol{s}_2)$, $(\boldsymbol{s}_1\boldsymbol{r})$ и $(\boldsymbol{s}_2\boldsymbol{r})$.

Произведения $(\boldsymbol{s}_1\boldsymbol{r})$ и $(\boldsymbol{s}_2\boldsymbol{r})$ не могут входить в потенциальную энергию порознь, так как вектор спина является аксиальным вектором, а произведение $(\boldsymbol{sr})$ — псевдоскаляром, изменяющим свой знак при отражении координат. Произведение $(\boldsymbol{s}_1\boldsymbol{r})(\boldsymbol{s}_2\boldsymbol{r})$ не изменяет знака при отражении и, следовательно, можно входить в потенциальную энергию. Спиновые операторы в высших степенях не входят в оператор энергии взаимодействия $U$, так как высшие степени операторов спина с помощью формулы (60,17) сводятся к линейным комбинациям $\boldsymbol{s}$.

Таким образом, выражение для потенциальной энергии будет иметь вид

$$U = U_1(r) + U_2(r)(\boldsymbol{s}_1\boldsymbol{s}_2) + U_3(r)(\boldsymbol{s}_1\boldsymbol{r})(\boldsymbol{s}_2\boldsymbol{r}), \qquad (76,1)$$

где $U_1$, $U_2$, $U_3$ — некоторые функции, зависящие от расстояния между частицами. Помимо оператора (76,1), представляющего потенциальную энергию обычного типа, взаимодействие между протоном и нейтроном может иметь характер обменных сил. Согласно результатам § 67, последнюю можно записать с помощью оператора обмена $\hat{P}_{12}$ в виде

$$U_{\text{обм}} = \hat{P}_{12}\left[U_4(r) + U_5(r)(\boldsymbol{s}_1\boldsymbol{s}_2) + U_6(r)(\boldsymbol{s}_1\boldsymbol{r}_1)(\boldsymbol{s}_2\boldsymbol{r}_2)\right]. \qquad (76,2)$$

Здесь $U_4$, $U_5$ и $U_6$ — функции расстояния между частицами, не зависящие от их спинов. Для общности считается, что вид этих функций отличен от вида функций $U_1$, $U_2$, $U_3$, входящих в потенциальную энергию обычного взаимодействия. Полная энергия взаимодействия равна сумме выражений (76,1) и (76,2). Совокупность данных о стабильных состояниях дейтона, изучение рассеяния нейтронов протонами и др. не позволяют пока определить вид этих функций. Более того, нет оснований считать какую-либо из этих функций малой по сравнению с другими. Таким образом, даже простейшая ядерная система оказывается неизмеримо более сложной, чем атомные системы.

Опытные данные позволяют уже сейчас произвести классификацию состояний дейтона. Гамильтониан системы из двух нуклонов — протона и нейтрона — с написанной выше энергией взаимодействия, как легко видеть, приводит к двум законам сохранения: закону сохранения полного момента и закону сохранения четности.

Состояния дейтона обозначаются такими же символами, как и состояния атомов. Состояния с орбитальным моментом $L = 0$, 1, 2, ... обозначаются соответственно $S$, $P$, $D$ и т. д. Мультиплетность $(2S + 1)$-терма обозначается индексом, стоящим в левом верхнем углу ($S$ — полный спин дейтона). Индекс в правом нижнем углу указывает полный момент $J$ дейтона. Например, в состоянии ${}^3P_0$ полный спин равен единице, $L = 1$, и полный момент равен нулю.

Обсудим возможные состояния системы с учетом того, что спин нейтрона и протона равен $1/2$. Формальное применение правила сложения моментов приводит к следующим возможным состояниям системы:

$$^1S_0, \quad ^1P_1, \quad ^1D_2 \qquad \text{(синглеты)},$$
$$^3S_1, \quad ^3P_0, \quad ^3P_1, \quad ^3P_2, \quad ^3D_1, \quad ^3D_2, \quad ^3D_3 \qquad \text{(триплеты)}.$$

$S$- и $D$-состояния являются четными, $P$ — нечетным состоянием. Состояний с $L > 2$ мы не выписываем. Какие именно из этих состояний реализуются в природе, можно установить только из опытных данных. Опыт показывает, что основным состоянием дейтона является четное состояние с $J = 1$ [1]).

Далее, пользуясь правилами сложения моментов, установим возможные состояния системы с полным моментом $J = 1$.

Суммарный спин системы, состоящий из нейтрона и протона, может равняться нулю либо единице. Если спин равен нулю, то возможно только одно состояние $L = 1$, приводящее к полному моменту $J = 1$. При спине, равном единице, орбитальный момент может принимать три значения: $L = 0,\ 1,\ 2$. Следовательно, всего возможны четыре состояния: $^1P_1$, $^3S_1$, $^3P_1$, $^3D_1$; состояния $^1P_1$ и $^3P_1$ не могут реализоваться, поскольку они являются нечетными.

Далее, легко заметить, что невозможны суперпозиции таких состояний, как $^3S_1 + {}^3P_1$ или $^3S_1 + {}^1P_1$, так как $S$- и $P$-состояния имеют различные четности и волновая функция, отвечающая их суперпозиции, не является собственной функцией оператора четности.

Таким образом, дейтон может находиться либо в состоянии $^3S_1$, либо в состоянии $^3D_1$, либо в состоянии, являющемся суперпозицией этих двух состояний. Состояние $S$ сферически-симметрично. Если бы дейтон находился в этом состоянии, то его квадрупольный момент был бы равен нулю. Опыт показывает, однако, что квадрупольный момент дейтона отличен от нуля, хотя и мал. Это означает, что нормальное состояние дейтона представляет суперпозицию сферически-симметричного $^3S_1$-состояния и асимметричного $^3D_1$-состояния.

Зная экспериментальное значение квадрупольного момента дейтона, можно оценить вклад, который вносит $^3D_1$-состояние в волновую функцию дейтона. Этот вклад оказывается малым. Таким образом, можно считать, что дейтон является сферически-симметричной системой с небольшой примесью асимметрии, вносимой $D$-состоянием.

---

[1]) См. Л. Д. Ландау и Я. А. Смородинский, Лекции по теории ядра, Гостехиздат, 1955; А. И. Ахиезер и И. Я. Померанчук, Некоторые вопросы теории ядра, Гостехиздат, 1950, §§ 2 и 5.

Для дальнейших оценок рассмотрим грубую модель дейтона, в которой будем считать, что потенциальная энергия взаимодействия между нейтроном и протоном зависит только от расстояния между ними. Иными словами, в формуле (76,1) оставим только первый член $U_1(r) \equiv U(r)$. Асимметрией дейтона мы будем при этом пренебрегать, считая, что он находится в основном состоянии. Уравнение для относительного движения нейтрона и протона в соответствии с формулой (14,11) можно написать в виде

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta + U(r)\right]\psi_0 = \varepsilon\psi_0. \qquad (76,3)$$

Приведенная масса системы в этом случае равна

$$\frac{1}{\mu} = \frac{1}{m_p} + \frac{1}{m_n},$$

где $m_p$ — масса протона, $m_n$ — масса нейтрона.

Так как $m_p \approx m_n$, то получаем:

$$\frac{1}{\mu} = \frac{2}{m_p}.$$

Относительно потенциальной энергии $U(r)$ мы ограничимся лишь общим допущением о ее быстром стремлении к 0 при $r \to r_0$, где $r_0$ — радиус действия ядерных сил. При $r < r_0$ конкретным видом $U(r)$ мы задаваться не можем, так как не знаем закона взаимодействия ядерных сил.

Если искать функцию $\psi_0$ в виде

$$\psi_0(r) = \frac{\chi(r)}{r}, \qquad (76,4)$$

то, используя формулу (35,16) с $l = 0$, мы получим уравнение для функции $\chi(r)$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{m_p}\frac{d^2}{dr^2} + U(r)\right]\chi(r) = \varepsilon\chi(r). \qquad (76,5)$$

При $r > r_0$ уравнение (76,5) запишется в форме

$$-\frac{\hbar^2}{m_p}\frac{d^2\chi}{dr^2} = \varepsilon\chi. \qquad (76,6)$$

Будем искать решение, убывающее на бесконечности в виде

$$\chi = Ce^{-\alpha r}. \qquad (76,7)$$

Подставляя (76,7) в (76,6), получим соотношение для $\alpha$

$$-\frac{\hbar^2}{m_p}\alpha^2 = \varepsilon = -|\varepsilon|,$$

$$\alpha = \sqrt{\frac{m_p|\varepsilon|}{\hbar^2}}. \qquad (76,8)$$

При этом для волновой функции имеем

$$\psi_0 = C\frac{e^{-\alpha r}}{r}. \qquad (76,9)$$

За характеристику размеров дейтона можно выбрать величину $r_1 = \frac{1}{\alpha}$, т. е. такое расстояние, на котором волновая функция $\chi$ уменьшается в $e$ раз. Расстояние $r_1$ легко определить из соотношения (76,8), так как энергия связи дейтона хорошо известна из опытных данных. Она равна $|\varepsilon| = 2{,}19$ *Мэв*. Подставляя значение $\hbar$ и $m_p$ в формулу (76,8), получим $r_1 = 4{,}3\cdot 10^{-13}$ *см*. Следовательно, волновая функция $\psi_0$ дейтона отлична от нуля в области значительно большей, чем область действия ядерных сил ($r_0 \approx 2\cdot 10^{-13}$ *см*). Таким образом, мы видим, что нейтрон и протон с большой вероятностью могут быть обнаружены на таких расстояниях друг от друга, которые существенно превосходят размеры области действия ядерных сил.

В области $r < r_0$ нельзя определить зависимость волновой функции $\psi_0$ от расстояния, так как потенциальная энергия в этой области неизвестна.

Однако из общей теории движения в сферически-симметричном поле следует, что при $r \to 0$ функция $\chi$ пропорциональна $r^{l+1}$ (см. § 35) и, следовательно, в $S$-состоянии пропорциональна $r$. Таким образом, на малых расстояниях функция $\chi$ стремится к нулю.

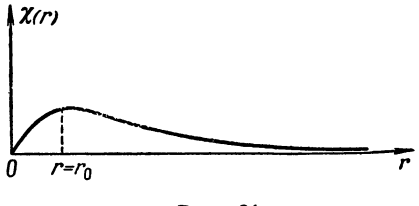


Рис. 21.

Постоянную $C$, входящую в $\psi$-функцию, можно найти из условия нормировки. В качестве волновой функции $\psi_0$ при $r < r_0$ возьмем ее значение в виде (76,9), которое будем считать справедливым во всем пространстве. При этом мы не вносим существенной ошибки, так как большая часть нормировочного интеграла относится к области $r > r_0$. Подставляя (76,9) в условие нормировки, находим:

$$C = \sqrt{\frac{\alpha}{2\pi}}. \qquad (76.10)$$

Установим теперь общее соотношение между шириной ямы $r_0$ и ее глубиной. Для этого проинтегрируем уравнение (76,5) в пределах от нуля до $r = r_0$. В результате интегрирования получим:

$$\chi'_{r=r_0} - \chi'_{r=0} = \frac{m_p}{\hbar^2}\int_0^{r_0} U(r)\,\chi(r)\,dr + \frac{m_p|\varepsilon|}{\hbar^2}\int_0^{r_0}\chi\,dr. \qquad (76,11)$$

Как видно из рис. 21, значение производной $|\chi'|$, взятой в точке $r = r_0$, значительно меньше производной $|\chi'_{r=0}|$. Кроме того, можно пренебречь энергией связи по сравнению с потенциальной энергией взаимодействия, т. е. считать $|\varepsilon| < |U(r)|$ при $r < r_0$. На малых расстояниях $\chi = Nr$, где $N$ — некоторая константа. Тогда (76,11) преобразуется к виду

$$-N = \frac{m_p}{\hbar^2} N \int_0^{r_1} U(r)\, r\, dr \tag{76,12}$$

или

$$\int_0^{r_0} U(r)\, r\, dr = -\frac{\hbar^2}{m_p}. \tag{76,13}$$

Заменяя интеграл в (76,13) на $U_0 r_0^2$, где $U_0$ — некоторая средняя энергия взаимодействия, т. е. средняя глубина ямы, получим по порядку величины:

$$U_0 \approx -\frac{\hbar^2}{m_p r_0^2} \sim -40 \text{ Мэв}.$$

## § 77. Теория ядерных оболочек

В отличие от атомов, у которых взаимодействие между электронами имеет второстепенный характер и происходит на фоне основного фактора — притяжения к ядру, в атомных ядрах нет выделенного центра взаимодействий.

Наоборот, все ядерные частицы — нуклоны — интенсивно взаимодействуют между собой мощными ядерными силами. Поэтому долгое время казалось, что различать состояния индивидуальных частиц в ядре не имеет смысла, а можно говорить лишь о состоянии системы как целого.

Оказалось, однако, что целый ряд наблюдавшихся свойств атомных ядер указывает на сохранение индивидуальности нуклонов в ядрах. По-видимому, сохранение индивидуальности частиц в ядрах связано с тем, что ядерные силы весьма быстро убывают с расстоянием, а кинетическая энергия нуклонов в ядрах весьма велика.

Исходя из предположения, что каждый из ядерных нуклонов движется в самосогласованном поле, образованном всеми остальными нуклонами, оказалось возможным объяснить целый ряд важных свойств ядер.

Самосогласованное поле большинства ядер является сферически-симметричным. Разумеется, точный закон распределения потенциала внутри ядра неизвестен. Оказалось, однако, что характер расположения уровней сравнительно мало зависит от

принимаемой модели потенциального поля, если только она правильно передает основную особенность поля ядра как целого — резкое возрастание потенциала на его поверхности, $r=R$. Самая простая модель ядра — это сферическая потенциальная яма бесконечной глубины. В этой модели самосогласованное потенциальное поле $U$, в котором движется отдельный нуклон, имеет вид

$$U=\begin{cases} 0, & r<R, \\ \infty, & r\geqslant R. \end{cases}$$

Уже эта весьма упрощенная модель позволяет получить общее представление о свойствах и расположении уровней. Волновая функция удовлетворяет уравнению

$$\frac{d^2\psi}{dr^2}+\frac{2}{r}\frac{d\psi}{dr}+\frac{l(l+1)}{r^2}\psi-k^2\psi=0, \qquad (77,1)$$

где $k^2=\frac{2mE}{\hbar^2}$. Решением этого уравнения служит выражение (36,9). Граничное условие на поверхности ядра

$$\psi=0 \quad \text{при} \quad r=R \qquad (77,2)$$

приводит к условию

$$J_{l+\frac{1}{2}}(kR)=0. \qquad (77,3)$$

При данном значении орбитального момента уровни энергии, являющиеся корнями трансцендентного уравнения (77,3), классифицируются с помощью главного квантового числа $n$. Наименьшему корню этого трансцендентного уравнения отвечает волновая функция, не имеющая узлов при $r<R$. Этот уровень классифицируется как уровень с $n=1$. Следующий корень (77,3) отвечает волновой функции, имеющей один узел при $r<R$. Соответствующее состояние обозначается как $n=2$ и т. д. При данном $n$ $l$ может принимать любые значения. При этом энергия нуклона растет с ростом орбитального момента.

Порядок расположения уровней дается последовательностью

$$1s,\ 1p,\ 1d,\ 2s,\ 1f,\ 2p,\ 1g,\ 2d\ \ldots$$

Оказалось, что в атомных ядрах важную роль играет спин-орбитальное взаимодействие, которое до сих пор вовсе не учитывалось. Особая роль спин-орбитального взаимодействия связана с тем, что благодаря быстрому убыванию ядерных сил с расстоянием между частицами энергия парного взаимодействия в среднем мала. Значительная величина спин-орбитального взаимодействия приводит к установлению в ядрах $j-j$ связи. Спиновый и орбитальный моменты каждого нуклона складываются в полный момент $j$. Энергия нуклона оказывается зависящей от

его спина. В ядрах реализуется обращенная структура уровней, так что уровни с большими $j$ лежат ниже уровней с меньшими $j$. Состояния нуклонов обозначаются символом $nl_j$, например, $1s_{1/2}$ или $2p_{3/2}$. Поскольку нуклоны подчиняются принципу Паули, в каждом состоянии с данными значениями $n$, $l$ и $j$ может находиться $(2j+1)$ нейтрон и $(2j+1)$ протон. Благодаря этому в ядрах возникает ситуация, весьма сходная с той, которая имеет место в атомах: состояния нуклонов можно разбить на группы или оболочки. При заполнении каждой оболочки возникает замкнутая конфигурация, обладающая наибольшей устойчивостью — в данном случае наибольшей энергией связи нуклона в ядре. Расположение состояний по энергиям и число нуклонов в этих состояниях дается следующей таблицей:

| | |
|---|---|
| $1s_{1/2}$ | 2 |
| $1p_{3/2}$, $1p_{1/2}$ | 6 |
| $1d_{5/2}$, $1d_{1/2}$, $2s_{1/2}$, $1f_{7/2}$ | 20 |
| $2p_{3/2}$, $1f_{5/2}$, $2p_{1/2}$, $1g_{9/2}$ | 22 |
| $2d_{5/2}$, $1g_{7/2}$, $1h_{11/2}$, $2d_{3/2}$, $3s_{1/2}$ | 32 |
| $2f_{7/2}$, $1h_{9/2}$, $2i_{13/2}$, $2f_{5/2}$, $3p_{3/2}$, $3p_{1/2}$ | 44 |

Из этой таблицы видно, что в замкнутых оболочках помещается последовательно 2, 8, 28, 50, 82 и 126 нуклонов.

Соответственно, особой устойчивостью обладают ядра с полным числом нуклонов, даваемых этими числами, которые называются магическими.

Особой устойчивостью обладают ядра, у которых и число протонов и число нейтронов являются магическими. Такими ядрами являются, например, $He_2^4$ и $O_8^{16}$. Их часто называют дважды магическими. Эта простейшая схема позволяет объяснить не только особую устойчивость и распространенность в природе некоторых изотопов, но и ряд других свойств атомных ядер, например, их магнитные моменты. Однако в ряде случаев она оказывается недостаточной. Так, например, ядра с незаполненными оболочками обнаруживают отклонения от сферической формы. Это проявляется в наличии вращения ядра как целого. Экспериментальным доказательством вращения ядра служит наличие в спектрах ядер структуры (идентично со структурой спектров двухатомных молекул).

Мы не можем останавливаться на деталях, которые читатель найдет в специальной литературе [1]).

[1]) См., например, П. Э. Немировский, Современные модели атомного ядра, Атомиздат, 1960.

ГЛАВА X

# ТЕОРИЯ ДВУХАТОМНЫХ МОЛЕКУЛ

## § 78. Адиабатическое приближение и классификация электронных термов

Мы перейдем теперь к изучению свойств более сложной системы — молекулы. При этом мы ограничимся рассмотрением простейших двухатомных молекул. На этом простом примере будут иллюстрированы основные свойства молекулярных систем.

Мы видели в предыдущей главе, что расчет атомов производится приближенными методами. Естественно, что в теории молекул также широко используются приближенные способы расчетов. Гамильтониан двухатомной молекулы имеет вид

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2M_1}\Delta_1-\frac{\hbar^2}{2M_2}\Delta_2-\sum_{k=1}^{n}\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_k+U(\boldsymbol{r}_k, \boldsymbol{R}_i)\right]\times$$
$$\times\psi_{\text{мол}}(\boldsymbol{r}_k, \boldsymbol{R}_i)=E\psi_{\text{мол}}(\boldsymbol{r}_k, \boldsymbol{R}_i). \quad (78,1)$$

Здесь $M_1$ и $M_2$ — масса ядер, $m$ — масса электронов, $\boldsymbol{r}_k$ — координаты электронов, $\boldsymbol{R}_i$ — координаты ядер. Потенциальная энергия $U(\boldsymbol{r}_k, \boldsymbol{R}_i)$ включает взаимодействие электронов с ядрами, электронов между собой и ядер друг с другом. Суммирование по $k$ ведется по всем электронам молекулы. Скорость ядер, имеющих массы в несколько тысяч раз бо́льшие, чем у электронов, существенно меньше электронных. В соответствии с этим в теории молекул пользуются адиабатическим приближением. Волновая функция системы представляется в виде

$$\psi_{\text{мол}}=\alpha_n(\boldsymbol{R}_i)\,\psi_n(\boldsymbol{r}_k, \boldsymbol{R}_i).$$

Используя формулы (57,7) и (57,8), мы можем написать уравнения для функций $\alpha$ и $\psi$:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\sum\Delta_k+U(\boldsymbol{r}_k, \boldsymbol{R}_i)\right]\psi_n=E_n(\boldsymbol{R}_i)\,\psi_n, \quad \hat{H}_{\text{эл}}\psi_n=E_n\psi_n, \quad (78,2)$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2M_1}\Delta_1-\frac{\hbar^2}{2M_2}\Delta_2+E_n(\boldsymbol{R}_i)\right]\alpha_n(\boldsymbol{R}_i)=E\alpha_n(\boldsymbol{R}_i). \quad (78,3)$$

Уравнение (78,2) описывает движение электронов при неподвижных ядрах. Величина $E_n(\boldsymbol{R}_i)$ определяет уровни энергии системы при неподвижных ядрах, находящихся на фиксированном расстоянии друг от друга. Энергию $E_n$ при заданном расстоянии между ядрами называют электронным термом.

Уравнение Шредингера (78,3) описывает движение ядер. Входящая в него величина $E_n(\boldsymbol{R}_i)$ имеет смысл потенциальной энергии ядер. Из уравнения (78,3) мы видим, что полная энергия ядер $E$ зависит от состояния электронной части системы, от электронного терма.

Число электронов в молекуле всегда больше единицы. Поэтому даже решение приближенного уравнения (78,2) сопряжено с большими, а для многоэлектронных молекул — с непреодолимыми математическими трудностями [1]). Мы вынуждены, не делая попыток решения уравнения (78,2), найти самые общие свойства системы электронов, движущихся в поле двух ядер.

Найдем для этого, как всегда, величины, коммутирующие с оператором Гамильтона $\hat{H}_{эл}$, иными словами, найдем величины, которые одновременно имеют определенные значения в стационарных состояниях системы. В отличие от атомного поля, обладающего сферической симметрией, поле двухатомной молекулы обладает цилиндрической симметрией. Осью симметрии служит прямая, соединяющая оба ядра, которую в дальнейшем мы выберем за ось $z$. При повороте на угол $\varphi$ относительно оси $z$ потенциальная энергия взаимодействия электронов с ядрами, а также взаимодействия электронов между собой не изменяется. Поэтому оператор Гамильтона системы электронов

$$\hat{H}_{эл} = -\frac{\hbar^2}{2m}\sum_k \Delta_k + U$$

не зависит от цилиндрического угла $\varphi$.

Таким образом, мы приходим к выводу, что сохраняется проекция полного момента электронов на ось молекулы. Пренебрегая слабым спин-орбитальным взаимодействием, можно считать, что сохраняется также проекция орбитального момента электронов на ось $z$. Состояния электронов классифицируются по собственным значениям оператора $L_z$. Собственные значения проекции орбитального момента электронов на ось молекулы обозначают буквой $\Lambda$. Состояния с $\Lambda = 0, 1, 2$ принято именовать $\Sigma$-, $\Pi$- и $\Delta$-состояниями (по аналогии с $S$-, $P$- и $D$-состояниями атомов). Второй величиной, сохраняющейся у системы электронов в молекуле, является полный спин электронов $S$.

---

[1]) Исключение составляет ион $H_2^+$, для которого получено точное решение уравнения Шредингера для электронной части волновой функции.

Все рассуждения по поводу полного спина, приведенные в теории атома, полностью относятся и к молекуле.

При классификации электронного терма молекулы мультиплетность $2S+1$, как и у атома, указывают в виде индекса в верхнем левом углу при квантовом числе $\Lambda$, т. е. в виде $^{2S+1}\Lambda$.

Покажем далее, что при отражении координат электронов в любой плоскости, проходящей через ядра молекулы (т. е. через ось $z$) гамильтониан $\hat{H}_{эл}$ не изменяется. Иными словами, покажем, что гамильтониан коммутирует с оператором отражения. В этом легко убедиться, если, например, плоскость, в которой происходит отражение, выбрать так, чтобы она проходила через оси $z$ и $y$. В этом случае отражение соответствует замене всех координат $x_i \rightarrow -x_i$. Но так как взаимодействие зависит только от расстояния между частицами $(x_1 - x_2)^2$, то коммутативность гамильтониана и оператора отражения становится очевидной. Отсюда следует, что оператор $\hat{H}_{эл}$ и оператор отражения в плоскости, проходящей через ось молекулы, имеют общие собственные функции. Поэтому стационарные состояния могут характеризоваться, кроме собственных чисел $\Lambda$, собственными значениями $P_i$ оператора отражения. Последние, как легко видеть, принимают два значения $P_i = \pm 1$. Дело, однако, осложняется тем, что оператор проекции момента $\hat{L}_z$ не коммутирует с оператором отражения. Действительно, оператор проекции момента на ось $z$ имеет вид

$$\hat{L}_z = -i\hbar y \frac{\partial}{\partial x} + i\hbar x \frac{\partial}{\partial y}.$$

При отражении в плоскости $zy$ координата $x$ будет изменять свой знак, в то время как $y$ остается неизменным. Отсюда непосредственно следует, что операторы $\hat{P}_i$ и $\hat{L}_z$ не коммутируют. Поэтому нельзя одновременно характеризовать молекулярные термы с помощью величины $\Lambda$ и $P_i$, за исключением термов, у которых проекция момента $L_z = 0$. В последнем случае возможны состояния с четностью $P_i = 1$ и четностью $P_i = -1$, которые обозначаются как $\Sigma^+$ и $\Sigma^-$.

Волновые функции, отвечающие этим состояниям, соответственно изменяют и не изменяют знак при воздействии оператора $\hat{P}_i$ отражения в плоскости, проходящей через ядра молекул.

Рассмотрим теперь частный случай молекулы с одинаковыми ядрами. Если выбрать начало координат в точке, лежащей на оси $z$ и делящей расстояние между ядрами пополам, то легко видеть, что оператор инверсии электронных координат (отвечающий замене всех координат электронов на обратные $\mathbf{r}_i \rightarrow -\mathbf{r}_i$) коммутирует с оператором гамильтона $\hat{H}_{эл}$. Так как одновременно с $\hat{H}_{эл}$ коммутирует оператор $\hat{P}_i$ отражения

электронных координат в плоскости, проходящей через ядра молекул, то состояние с $L=0$ может характеризоваться тремя собственными значениями $\Lambda = 0$, $P_i = \pm 1$ и собственными значениями оператора инверсии (см. § 33). Последние имеют два значения $\pm 1$, обозначаемые буквами $g$ (четное состояние) и $u$ (нечетное состояние). Эти индексы помещаются справа внизу. Например, ${}^1\Sigma_g^+$ отвечает терму, волновая функция которого четна, не меняет знака при воздействии оператора отражения в плоскости, проходящей через ось $z$, проекция момента на ось $z$ равна нулю, терм синглетный. Мы знаем далее, что оператор инверсии коммутирует с оператором $L_z$. Поэтому состояния с $\Lambda \neq 0$ также могут быть как четными, так и нечетными. Иными словами, возможны состояния $\Pi_u$, $\Pi_g$, $\Delta_u$, $\Delta_g$ и т. д.

Остановимся на вопросе о вырождении электронных термов. Если $\Lambda$ задано, то это означает, что определена абсолютная величина проекции момента на ось $z$. Так как энергия системы не может зависеть от ориентации проекции момента относительно оси $z$, т. е. одинакова при $L_z = +\Lambda$ и $L_z = -\Lambda$, то мы приходим к выводу, что каждый терм с $L_z \neq 0$ двухкратно вырожден. Укажем, наконец, что энергия электронных термов молекулы того же порядка, что и энергия атомных термов.

## § 79. Молекула водорода, понятие о теории химической связи

Единственной молекулой, для которой удается получить достаточно точное решение уравнения для электронного терма, является молекула водорода. Вычисление терма молекулы водорода имеет важное принципиальное значение.

Если отсчитывать энергию от энергии неподвижных разведенных атомов, то стабильной молекуле отвечают отрицательные значения электронных термов. Энергия (отрицательная) молекулы является мерой химической связи образующих ее атомов. Таким образом, расчет электронных термов молекулы является вместе с тем количественной теорией химической связи между атомами.

Установление природы химической связи является одним из фундаментальных результатов квантовой механики.

До появления квантовой механики не существовало каких-либо обоснованных представлений о природе химической связи, в особенности о природе гомеополярных молекул. Напомним, что под гомеополярными молекулами понимают молекулы, построенные из нейтральных атомов. К таким молекулам относятся, например, молекулы, содержащие одинаковые атомы. Мы попытаемся на примере молекулы водорода выяснить некоторые характерные особенности теории химической связи.

Уравнение Шредингера для электронных термов молекулы водорода имеет вид

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_1-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_2+\frac{e^2}{R}-\frac{e^2}{r_{a_1}}-\frac{e^2}{r_{a_2}}-\frac{e^2}{r_{b_1}}-\frac{e^2}{r_{b_2}}+\frac{e^2}{r_{12}}\right)\psi=E\psi. \quad (79,1)$$

Здесь $R$ — расстояние между ядрами атомов водорода; величины $r_{a_1}$, $r_{a_2}$, $r_{b_1}$, $r_{b_2}$ — соответственно расстояния между ядром $a$ и первым электроном, ядром $a$ и вторым электроном, ядром $b$ и первым электроном, ядром $b$ и вторым электроном; $r_{12}$ — расстояние между электронами.

Если атомы, образующие молекулу, разведены на бесконечно большое расстояние, можно утверждать, что один из электронов, например $N_1$, будет связан с ядром $a$, а другой (электрон $N_2$) — с ядром $b$. При сближении атомов, в силу тождественности электронов, такое утверждение теряет смысл.

Точное решение уравнения Шредингера (79,1) представляет большие математические трудности, поэтому был проведен целый ряд приближенных расчетов. Мы воспользуемся теорией возмущений, позволяющей сравнительно просто выяснить основные особенности системы. Вопрос о степени точности расчета будет обсужден позднее. В качестве волновой функции нулевого приближения выберем волновую функцию системы с бесконечно удаленными ядрами. При бесконечном удалении ядер друг от друга ($R\to\infty$) волновая функция системы из двух электронов и двух ядер имеет вид

$$\varphi_1^0=\psi_a(\boldsymbol{r}_{a_1})\,\psi_b(\boldsymbol{r}_{b_2}), \quad (79,2)$$

где $\psi_a(\boldsymbol{r}_{a_1})$ и $\psi_b(\boldsymbol{r}_{b_2})$ — волновые функции атома водорода, в которых соответственно первый электрон находится при ядре $a$, второй электрон — при ядре $b$.

Очевидно, что эти функции удовлетворяют уравнениям

$$\left.\begin{aligned}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_1-\frac{e^2}{r_{a_1}}\right)\psi_a(\boldsymbol{r}_{a_1})&=E_0\psi_a(\boldsymbol{r}_{a_1}),\\ \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_2-\frac{e^2}{r_{b_2}}\right)\psi_b(\boldsymbol{r}_{b_2})&=E_0\psi_b(\boldsymbol{r}_{b_2}).\end{aligned}\right\} \quad (79,3)$$

Нас интересует нормальное состояние молекулы водорода. Поэтому под $E_0$ следует понимать низший энергетический уровень атома водорода. Состояние $\varphi_1^0$ является вырожденным. Действительно, этой же энергией обладает состояние

$$\varphi_2^0=\psi_a(\boldsymbol{r}_{a_2})\,\psi_b(\boldsymbol{r}_{b_1}), \quad (79,4)$$

отличающееся от первого перестановкой электронов. Подчеркнем, что $\varphi_1^0$ и $\varphi_2^0$ являются собственными функциями различных операторов и не ортогональны друг к другу.

Волновые функции нулевого приближения представим в виде симметризованных комбинаций функций $\varphi_1^0$ и $\varphi_2^0$, т. е. в виде

$$\left.\begin{aligned}\psi_s^0 &= A_1\left[\psi_a(r_{a_1})\psi_b(r_{b_2}) + \psi_a(r_{a_2})\psi_b(r_{b_1})\right],\\ \psi_a^0 &= A_2\left[\psi_a(r_{a_1})\psi_b(r_{b_2}) - \psi_a(r_{a_2})\psi_b(r_{b_1})\right].\end{aligned}\right\} \tag{79,5}$$

Постоянные $A_1$ и $A_2$ определяются из условия нормировки

$$\int |\psi_s^0|^2 dV_1\, dV_2 = \int |\psi_a^0|^2 dV_1\, dV_2 = 1.$$

Они равны

$$A_1 = \frac{1}{\sqrt{2(1+s^2)}}; \qquad A_2 = \frac{1}{\sqrt{2(1-s^2)}},$$

где величина $s$ представляет степень неортогональности функций $\varphi_1^0$ и $\varphi_2^0$ и равна

$$s^2 = \int \varphi_1^0\varphi_2^0\, dV_1\, dV_2. \tag{79,6}$$

При таком выборе невозмущенных функций, которые представляют симметризованные волновые функции отдельных атомов, оператор возмущения включает взаимодействие электронов и ядер между собой и электронов с «чужими» ядрами. Непосредственное применение теории возмущений недопустимо: волновые функции нулевого приближения не ортогональны друг другу. Поэтому необходимо несколько модифицировать теорию возмущений. Напишем возмущенные волновые функции и энергию возмущенной системы в виде

$$\left.\begin{aligned}\psi_s &= \psi_s^0 + \psi_s',\\ \psi_a &= \psi_a^0 + \psi_a',\\ E &= E_0 + \varepsilon.\end{aligned}\right\} \tag{79,7}$$

Тогда уравнение (79,1) для функции $\psi_s'$ запишется в виде

$$\begin{aligned}&\frac{\hbar^2}{2m}(\Delta_1 + \Delta_2) A_1\left[\psi_a(r_{a_1})\psi_b(r_{b_2}) + \psi_a(r_{a_2})\psi_b(r_{b_1})\right] + \\ &\quad + \frac{\hbar^2}{2m}(\Delta_1+\Delta_2)\psi_s' + \left[E_0 + \varepsilon - \frac{e^2}{R} - \frac{e^2}{r_{12}} + \frac{e^2}{r_{a_1}} + \frac{e^2}{r_{a_2}} + \frac{e^2}{r_{b_1}} + \right.\\ &\quad\quad \left. + \frac{e^2}{r_{b_2}}\right] A_1\left[\psi_a(r_{a_1})\psi_b(r_{b_2}) + \psi_a(r_{a_2})\psi_b(r_{b_1})\right] + \\ &\quad\quad\quad + \left[E_0 + \varepsilon - \frac{e^2}{R} - \frac{e^2}{r_{12}} + \frac{e^2}{r_{a_1}} + \frac{e^2}{r_{a_2}} + \frac{e^2}{r_{b_1}} + \frac{e^2}{r_{b_2}}\right]\psi_s' = 0.\end{aligned}$$

Используя уравнения (79,3) и опуская малые члены, содержащие произведение оператора возмущения на возмущенную волновую функцию, получаем

$$\left\{\frac{\hbar^2}{2m}(\Delta_1+\Delta_2)+\frac{e^2}{r_{a_1}}+\frac{e^2}{r_{b_2}}+E_0\right\}\psi_s' =$$
$$= -\left\{A_1\left[\varepsilon-\frac{e^2}{R}-\frac{e^2}{r_{12}}\right]\psi_s^0+A_1\left(\frac{e^2}{r_{b_1}}+\frac{e^2}{r_{a_2}}\right)\varphi_1^0+A_1\left(\frac{e^2}{r_{a_1}}+\frac{e^2}{r_{b_2}}\right)\varphi_2^0\right\}. \tag{79,8}$$

Аналогичное выражение получается при подстановке $\psi_a$.

При дальнейших расчетах мы будем пользоваться следующей общей теоремой. Для существования решения уравнения с правой частью

$$(\hat{H}_0-E_k^0)\,\psi=\varphi$$

необходимо, чтобы правая часть $\varphi$ была ортогональна к функции $\psi_k^0$, удовлетворяющей однородному уравнению[1]).

Применяя эту теорему к (79,8), потребуем, чтобы правая часть (79,8) была ортогональна к решению однородного уравнения, т. е. к невозмущенной собственной функции $\varphi_1^0$. Умножая правую часть (79,8) на $\varphi_1^0$ и интегрируя, находим

$$\int\left(\varepsilon-\frac{e^2}{r_{12}}-\frac{e^2}{R}\right)[\varphi_1^0\pm\varphi_2^0]\,\varphi_1^0\,dV+$$
$$+\int\left(\frac{e^2}{r_{b_1}}+\frac{e^2}{r_{a_2}}\right)(\varphi_1^0)^2\,dV\pm\int\left(\frac{e^2}{r_{a_1}}+\frac{e^2}{r_{b_2}}\right)\varphi_1^0\varphi_2^0\,dV=0,$$

---

[1]) Доказательство особенно легко провести в случае невырожденного спектра. Запишем уравнение в виде

$$\left(\hat{H}_0-E_n^0\right)\psi=\varphi, \tag{1}$$

где $\hat{H}_0$ — линейный оператор, имеющий невырожденный спектр собственных значений

$$\hat{H}_0\psi_k^0=E_k^0\psi_k^0.$$

Разложим функцию $\psi$ по функциям $\psi_k^0$:

$$\psi=\sum a_k\psi_k^0.$$

Подставляя $\psi$ в (1), имеем

$$\sum_{k\neq n} a_k\left(E_k^0-E_n^0\right)\psi_k^0=\varphi.$$

Вычисляя интеграл $\int\psi_n^0\varphi_{dx}$, находим, что он равен нулю. Это и доказывает наше утверждение.

где знак плюс относится к симметричной функции. Аналогичные выкладки приводят к формуле со знаком минус в случае антисимметричной функции.

Учитывая условие нормировки, имеем

$$\varepsilon(1 \pm s^2) = \int \left(\frac{e^2}{R} + \frac{e^2}{r_{12}} - \frac{e^2}{r_{b_1}} - \frac{e^2}{r_{a_2}}\right)(\varphi_1^0)^2 \, dV \pm$$
$$\pm \int \left(\frac{e^2}{R} + \frac{e^2}{r_{12}} - \frac{e^2}{r_{a_1}} - \frac{e^2}{r_{b_2}}\right)\varphi_1^0 \varphi_2^0 \, dV.$$

Разрешая последнее уравнение относительно $\varepsilon$, находим поправку к энергии

$$\varepsilon = \frac{J \pm K}{1 \pm s^2}, \tag{79,9}$$

где

$$\left.\begin{aligned} J(R) &= e^2 \int \psi_a^2(r_{a_1}) \psi_b^2(r_{b_2}) \left[\frac{1}{R} - \frac{1}{r_{a_2}} - \frac{1}{r_{b_1}} + \frac{1}{r_{12}}\right] dV_1 \, dV_2, \\ K(R) &= e^2 \int \psi_a(r_{a_1}) \psi_b(r_{b_1}) \psi_a(r_{a_2}) \psi_b(r_{b_2}) \times \\ &\quad \times \left(\frac{1}{R} - \frac{1}{r_{a_1}} - \frac{1}{r_{b_2}} + \frac{1}{r_{12}}\right) dV_1 \, dV_2. \end{aligned}\right\} \tag{79,10}$$

В формуле (79,9) знак плюс соответствует симметричному состоянию, характеризуемому волновой функцией $\psi_s^0$, знак минус — антисимметричному состоянию (волновая функция $\psi_a^0$). Если $\psi_s^0$ и $\psi_a^0$ были бы взаимно ортогональны, то мы получили бы, что $s = 0$. При этом (79,9) совпала бы с обычной формулой теорий возмущений для поправки к энергии.

Найденные выражения $J$ и $K$ аналогичны интегралам, полученным в § 67. Интеграл $J$ определяет кулоновское взаимодействие ядер и электронов друг с другом. Величина $K$ представляет обменную энергию. Полная волновая функция молекулы водорода представляет произведение координатной и спиновой функции. Так как полная функция системы должна быть антисимметричной, то симметричную по координатам функцию следует умножить на антисимметричную спиновую функцию и наоборот. Поэтому состояние $(\psi_s^0)$ является состоянием со спином электронов, равным нулю (синглетное состояние). Аналогичные рассуждения показывают, что волновая функция $\psi_a^0$ описывает состояние молекулы со спином, равным единице. Для того чтобы выяснить, какое из этих двух состояний приводит к связанному состоянию (молекуле), надо найти зависимость величины $\varepsilon$ от радиуса $R$. Это можно сделать, если в интегралы (79,10) вместо $\psi_a$ и $\psi_b$ подставить волновые функции нормаль-

ного состояния атома водорода. Результаты вычисления удобно представить на графике (рис. 22). Здесь $E_1$ и $E_2$ — энергии молекулы, отвечающие соответственно синглетному и триплетному состояниям. Мы видим, что два атома водорода с полным электронным спином, равным единице, не могут образовать связанного состояния, так как $E_2$ не имеет минимума. Связанное состояние может быть лишь синглетным состоянием. Зная вид $E_1(R)$, можно определить энергию связи, а также эффективный размер молекулы. Минимум потенциальной энергии лежит при $R_0 = 0{,}79$ Å. Энергия связи не очень хорошо совпадает с экспериментальными значениями. Это обусловлено тем, что оператор, выбранный в качестве возмущения, не содержит малого параметра и не мал по сравнению с невозмущенным оператором. Поэтому количественное применение теории возмущений необоснованно. Несколько лучшие результаты дают другие приближенные методы. Однако общий качественный вывод о природе химической связи с образованием устойчивой молекулы из двух атомов правилен. Устойчивость молекулы целиком определяется величиной и знаком обменного интеграла. Именно, для образования устойчивого химического соединения необходимо (хотя и недостаточно), чтобы спины атомов были антипараллельны. Это обстоятельство часто подменяют не вполне точным утверждением — «силы химической связи являются обменными силами». В § 67 мы подробно обсудили квантовомеханическую теорию обменных сил и смысл такого рода формулировок. Во всяком случае, несомненно, что силы, ответственные за образование гомеополярных химических соединений, имеют специфический квантовомеханический характер. Часто говорят также, что «связываются антипараллельные спины». Предыдущий расчет ясно показывает большую степень условности такой терминологии. На примере молекулы водорода можно выявить не только квантовомеханическую природу сил химической связи, но и трудности, возникающие при расчетах образования молекулярных систем.

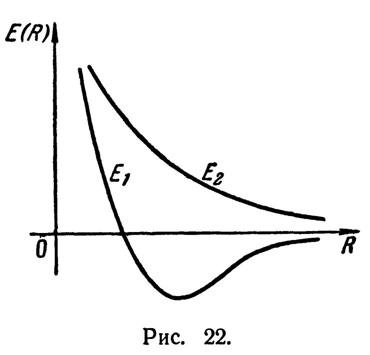


Рис. 22.

Приведенный расчет позволяет сделать общий вывод о том, что каждой валентности в химическом соединении отвечает пара электронов с антипараллельными спинами, связанных между собой обменным взаимодействием.

Отсюда следует, что ответственным за химические свойства атомов являются неспаренные внешние электроны, находящиеся

в незаполненных оболочках. Валентность атома определяется числом таких неспаренных электронов. При образовании гомеополярного химического соединения эти электроны «коллективизируются», т. е. не могут более считаться принадлежащими данному атому. Вместе с тем конфигурация незаполненного состояния видоизменяется так, что оно приближается к заполненной структуре. Иными словами, электроны спариваются так, что спины всех электронов в молекуле стремятся взаимно компенсироваться. Устойчивые гомеополярные молекулы имеют тенденцию к спариванию всех электронов. В наиболее устойчивых молекулах все электроны спарены, полный спин молекулы $S = 0$ и мультиплетность равна единице.

Эти качественные результаты хорошо согласуются с опытными данными для большинства молекул. Следует упомянуть еще о некоторых обстоятельствах, важных для понимания образования молекул. Первым из них является упомянутое в § 73 свойство атомов вступать в химическую связь не в нормальном, а в возбужденном состоянии. В свете разобранной только что теории это свойство становится понятным. При взаимодействии двух атомов возможен переход одного из них в возбужденное состояние под влиянием возмущения. Если энергия, выигрываемая при образовании соединения с атомом в возбужденном состоянии больше, чем в соединении с атомом в нормальном состоянии, то первое будет отвечать более устойчивой молекулярной конфигурации.

Так, например, в § 73 мы видели, что устойчивый терм атома углерода есть ${}^3P_0$. Углерод имеет два неспаренных электрона в $2p$-состоянии, и его валентность в нормальном состоянии равна двум.

Однако у атома углерода имеется возбужденное состояние с конфигурацией $1s^2$, $2s$, $2p^3$, в котором атом находится в состоянии ${}^5S$. Это состояние лежит на 4, 2 электронвольта выше нормального. В ${}^5S$-состоянии углерод имеет четыре неспаренных электрона и его валентность равна четырем. В соединениях, для которых выигрываемая энергия больше 4, 2 электронвольт, углерод выступает как четырехвалентный.

Вторым свойством молекул, следующим из общей теории, является их геометрическая форма. Образование химического соединения связано с величиной кулоновского и обменного интегралов, содержащих произведения волновых функций. Если среди этих волновых функций фигурируют волновые функции электронов в $p$-состоянии, обладающие анизотропией в пространстве (см. § 38), то наибольшее перекрытие волновых функций достигается в избранных пространственных направлениях. В виде примера можно привести молекулу $NH_3$. У атома азота, имеющего конфигурацию $1s^2$, $2s^2$, $2p^3$ — ${}^4S$, ответственными за

химическую связь являются три $p$-электрона. Волновые функции этих электронов имеют наибольшее значение в трех взаимно перпендикулярных направлениях. В образовавшейся молекуле $NH_3$ углы между связями N—H близки (хотя и не равны строго) к 90°.

Последним обстоятельством, важным для понимания строения молекул является то, что волновая функция возбужденного состояния представляет линейную комбинацию волновых функций электронов. Например, в упомянутом выше возбужденном состоянии атома углерода волновая функция является линейной комбинацией волновых функций — одного $2s$- и трех $2p$-электронов, $2s$- и $2p$-состояния могут входить с разными весами при образовании волновой функции. Это обстоятельство, именуемое гибридизацией состояний, позволяет, например, понять, почему все четыре валентности атома углерода совершенно идентичны между собой.

Отсылая за подробностями к специальным руководствам[1]), подчеркнем, что при переходе к количественным расчетам сил химической связи и строения образующихся молекул возникают очень большие расчетные трудности. Эти трудности связаны с тем, что взаимодействие, ответственное за образование химической связи, невзоможно считать малым возмущением.

## § 80. Взаимодействие атомов на больших расстояниях

Помимо сил химического характера, связывающих в некоторых случаях атомы в молекулы, между атомами, находящимися на сравнительно больших расстояниях друг от друга, происходит слабое взаимодействие. Рассмотрим два атома, находящихся на большом расстоянии друг от друга. Благодаря сферической симметрии атомы не имеют средних дипольных моментов. Однако недиагональные матричные элементы дипольных моментов отличны от нуля.

Наглядно можно представлять себе дипольные моменты атомов как результат квантовомеханического движения электронов, приводящего к появлению и исчезновению дипольного момента, который равен нулю только в среднем. В результате этого в обоих атомах индуцируются такие дипольные моменты. Часто в качестве наглядной иллюстрации разбирают взаимодействие двух осцилляторов, в которых индуцированные дипольные моменты непосредственно выражаются через их нулевые колебания.

---

[1]) См., например, У. Козман, Введение в квантовую химию, ИЛ, 1960; Г. Эйринг, Д. Уолтер, Д. Кимбал, Квантовая химия, ИЛ, 1948.

Энергия взаимодействия атомов может быть вычислена по теории возмущений. В качестве оператора возмущения следует взять энергию взаимодействия двух диполей, даваемую формулой (17,12) ч. 1. Поправка к энергии первого порядка равна

$$E_1 = H'_{nn} = \int \psi^* \left\{ \frac{\boldsymbol{d}_1\boldsymbol{d}_2 - 3(\boldsymbol{d}_1\boldsymbol{n})(\boldsymbol{d}_2\boldsymbol{n})}{R^3} \right\} \psi \, dV =$$
$$= \frac{\overline{\boldsymbol{d}}_1 \cdot \overline{\boldsymbol{d}}_2 - 3(\overline{\boldsymbol{d}}_1\boldsymbol{n})(\overline{\boldsymbol{d}}_2\boldsymbol{n})}{R^3} = 0$$

в силу $\overline{\boldsymbol{d}}_1 = \overline{\boldsymbol{d}}_2 = 0$. Поправка второго порядка может быть написана в виде

$$E_2 = \frac{1}{R^6} \sum_m \frac{[\boldsymbol{d}_1\boldsymbol{d}_2 - 3(\boldsymbol{d}_1\boldsymbol{n})(\boldsymbol{d}_2\boldsymbol{n})]^2_{mn}}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} = \frac{A}{R^6}.$$

Величина

$$A = \sum_m \frac{[\boldsymbol{d}_1\boldsymbol{d}_2 - 3(\boldsymbol{d}_1\boldsymbol{n})(\boldsymbol{d}_2\boldsymbol{n})]^2_{mn}}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}},$$

согласно результатам § 53, всегда отрицательна. Поэтому окончательно

$$U_{\text{в-д-в}} = E_2 = -\frac{\text{const}}{R^6}.$$

Полученная формула выражает закон взаимодействия Ван-дер-Ваальса. Это взаимодействие не имеет специфического характера в том смысле, что оно отвечает силам притяжения, убывающим как $\frac{1}{R^7}$ для всех атомов, независимо от их природы. Величина постоянной может быть выражена через поляризуемость атомов и варьируется для разных атомов. Таким образом, ван-дер-ваальсово взаимодействие между атомами представляет такой же характерный квантовомеханический эффект, как и химическое взаимодействие. Его нельзя понять на основе классических представлений, поскольку атомы не имеют «готового» дипольного момента.

Силы Ван-дер-Ваальса, в отличие от сил, приводящих к образованию химической связи, обладают аддитивностью. Если во взаимодействие вступают не два, а три и более атомов, то энергия взаимодействия системы, как и всякое другое слабое возмущение, получается сложением энергий попарных взаимодействий.

Полученный результат имеет вполне общий характер, поскольку мы не пользовались конкретным видом волновых функций.

Однако если атомы находятся не в $S$-состояниях, то они могут иметь отличное от нуля среднее значение квадрупольного момента. В этом случае, кроме найденного ван-дер-ваальсова взаимодействия, между атомами будет иметь место квадруполь-квадрупольное взаимодействие $\sim \frac{1}{R^5}$.

В отличие от атомов, молекулы могут обладать средним дипольным моментом. Если, однако, его величина мала, а также мал квадрупольный момент, то формула для $U_{\text{в-д-в}}$ относится и к молекулам.

Своеобразная ситуация возникает при взаимодействии двух одинаковых атомов, находящихся в разных состояниях, скажем, при взаимодействии возбужденного и невозбужденного атомов одного и того же элемента. В этом случае в системе возникает дополнительное вырождение, связанное с возможностью обмена возбуждениями между атомами.

Оператором возмущения и в этом случае является оператор диполь-дипольного взаимодействия. Однако энергия взаимодействия определяется не средним значением этого оператора, а из решения соответствующего секулярного уравнения (см. § 54). Если данные атомы имеют отличные от нуля матричные элементы перехода между основным и рассматриваемым возбужденным состоянием, то энергия взаимодействия оказывается отличной от нуля уже в первом приближении теории возмущений. В этом случае между атомами осуществляется диполь-дипольное взаимодействие с резонансной передачей возбуждения. Энергия этого взаимодействия, как легко видеть, убывает лишь обратно пропорционально кубу расстояния между атомами, $U \sim \frac{1}{R^3}$.

Предположим, например, что один из атомов находится в основном $^1S_0$-состоянии, а другой — в возбужденном $^1P_1$-состоянии. Волновые функции, отвечающие этим состояниям, обозначим через $\varphi$ и $\psi_m$ соответственно (индекс $m$ характеризует проекцию момента в состоянии $^1P_1$, $m = -1, 0, 1$). Таким образом, система из двух невзаимодействующих атомов оказывается шестикратно вырожденной. Она описывается невозмущенными функциями вида $\varphi(1)\psi_m(2)$ и $\varphi(2)\psi_m(1)$ $(m = -1, 0, 1)$. Матричные элементы от оператора взаимодействия $\hat{H}'$

$$\hat{H}' = \frac{\boldsymbol{d}_1\boldsymbol{d}_2}{R^3} - \frac{3(\boldsymbol{d}_1\boldsymbol{R})(\boldsymbol{d}_2\boldsymbol{R})}{R^5}$$

по этим волновым функциям не равны нулю для переходов между состояниями, отличающимися перебросом возбуждения. Вычисления удобно проводить в системе координат с осью $z$, направленной по вектору $\boldsymbol{R}$. Решая секулярное уравнение вида

(54,4), мы находим выражение для энергий взаимодействия

$$U_1 = \pm \frac{g^2}{R^3}, \qquad U_2 = \mp \frac{2g^2}{R^3}, \tag{80,1}$$

где через $g$ мы обозначили матричный элемент вида

$$g = \int \psi_0^* d_z \varphi \, dV.$$

Верхние знаки в формулах (80,1) относятся к симметричным, а нижние — к антисимметричным, по возбуждениям, состояниям. Энергии $U_1$ отвечают состояниям с $\Lambda = 1$, а энергии $U_2$ — с $\Lambda = 0$.

В газовых системах, в которых имеется значительная концентрация возбужденных атомов, диполь-дипольное взаимодействие с резонансной передачей возбуждения может играть более существенную роль, чем взаимодействие Ван-дер-Ваальса. Оно не исчезает при корректном усреднении по ориентациям дипольного момента атома и при определенных условиях дает основной вклад в термодинамические функции системы[1]. Резонансное диполь-дипольное взаимодействие не аддитивно.

## § 81. Сопоставление молекулярных термов с атомными

Состояния молекулы, образовавшейся из двух атомов, можно связать с состояниями последних, если представить себе процесс образования молекулы как результат их бесконечно медленного сближения.

В ходе процесса сохраняется проекция момента на ось, соединяющую оба ядра. С другой стороны, как мы видели выше, в молекуле будет сохраняться проекция момента $\Lambda$ на эту ось (см. § 78). Определим возможные значения $\Lambda$, а также число энергетических состояний вновь образовавшейся молекулы.

Пусть атомы характеризуются полными моментами, соответственно $L_1$ и $L_2$. Для определенности будем предполагать, что $L_1 > L_2$. Проекции моментов атомов могут принимать соответственно следующие значения:

$$M_1 = L_1, \quad L_1 - 1, \quad L_1 - 2, \ \ldots \ -L_1,$$
$$M_2 = L_2, \quad L_2 - 1, \quad L_2 - 2, \ \ldots \ -L_2.$$

Согласно определению величины $\Lambda$ (см. § 78) ее максимальному значению $\Lambda = L_1 + L_2$ соответствует единственное состояние, в котором проекции атомов равны $M_1 = L_1$, $M_2 = L_2$. Следующее возможное значение $\Lambda$ равно $\Lambda = L_1 + L_2 - 1$. Этому значению $\Lambda$ соответствуют два терма, возникших из двух со-

[1]) В. И. Мальнев, С. И. Пекар, ЖЭТФ 51, 1811 (1966); 58, 1113 (1970); Ю. А. Вдовин, ЖЭТФ 54, 445 (1968).

стояний, в первом $M_1 = L_1$, $M_2 = L_2 - 1$ и во втором $M_1 = L_1 - 1$, $M_2 = L_2$. Аналогично, значению $\Lambda = L_1 + L_2 - 2$ соответствуют 3 терма, возникших из состояний

$$M_1 = L_1, \quad M_2 = L_2 - 2, \quad M_1 = L_1 - 1, \quad M_2 = L_2 - 1,$$
$$M_1 = L_1 - 2, \quad M_2 = L_2.$$

Полученные результаты удобно свести в таблицу:

| | |
|---|---|
| при $\Lambda = L_1 + L_2$ | возможен 1 терм |
| при $\Lambda = L_1 + L_2 - 1$ | возможны 2 терма |
| при $\Lambda = L_1 + L_2 - 2$ | возможны 3 терма |
| . . . . . . . . . . . | |
| при $\Lambda = L_1 - L_2$ | возможны $2L_2 + 1$ терм |
| при $\Lambda = L_1 - L_2 - 1$ | возможны $2L_2 + 1$ терм |
| . . . . . . . . . . . | |
| при $\Lambda = 0$ | возможны $2L_2 + 1$ терм |

При определении всех возможных состояний системы следует учесть, что каждый уровень энергии с $\Lambda \neq 0$ является вырожденным, так как энергия системы не может зависеть от ориентации момента в пространстве. Особого рассмотрения требует $\Sigma$-терм.

Молекула оказывается в $\Sigma$-состоянии, если $M_1 = -M_2$. Это условие выполняется в $L_2$ случаях, когда проекции моментов $M_1 > 0$ и $M_2 < 0$, и в $L_2$ случаях при $M_1 < 0$ и $M_2 > 0$. Кроме того, $M_1$ и $M_2$ могут быть равны нулю. Следовательно, в $\Sigma$-состоянии молекула может образовываться из $2L_2 + 1$ энергетических состояний.

В § 78 мы отмечали, что $\Sigma$-термы разделяются на $\Sigma^+$- и $\Sigma^-$-термы, в зависимости от свойств симметрии системы. Свойства симметрии системы не изменяются при разведении атомов на бесконечно большое расстояние. Поэтому волновые функции системы для состояний $|M_1| = |M_2|$ могут быть записаны в виде симметричных или антисимметричных комбинаций

$$\psi_s = \psi_M^{(1)}\psi_{-M}^{(2)} + \psi_{-M}^{(1)}\psi_M^{(2)}, \tag{81,1}$$

$$\psi_a = \psi_M^{(1)}\psi_{-M}^{(2)} - \psi_{-M}^{(1)}\psi_M^{(2)}. \tag{81,2}$$

$\Sigma$-состояние, отвечающее значениям $M_1 = M_2 = 0$, определяется поведением функции $\psi = \psi_0^{(1)}\psi_0^{(2)}$ при отражении в плоскости, соединяющей ядра атомов. В зависимости от конкретных свойств волновых функций $\psi_0^{(1)}$ и $\psi_0^{(2)}$, возникают $\Sigma^+$- или $\Sigma^-$-термы. Таким образом, в $L_2$ случаях образуется молекула в $\Sigma^+$-состоянии и в $L_2$ случаях в $\Sigma^-$-состоянии. Еще один $\Sigma^+$- или $\Sigma^-$-терм возникает в зависимости от вида функции $\psi_0^{(1)}\psi_0^{(2)}$.

До сих пор рассматривали молекулы, образовавшиеся из двух различных атомов. Если молекула построена из одинаковых атомов, то подсчет ее возможных состояний несколько изменяется. Возможны два случая: когда разведенные атомы находятся в различных и когда они находятся в одинаковых состояниях. В первом случае число возможных термов следует удвоить по сравнению с числом термов молекулы, состоящей из различных атомов, так как состояние молекулы, построенной из одинаковых атомов, инвариантно относительно преобразования инверсии и возможно образование четных и нечетных термов. Если атомы находятся в одинаковых состояниях, то общее число состояний остается тем же, что и у молекулы с различными атомами. Вопрос о четности этих состояний довольно сложен [1]).

## § 82. Вращение и колебания молекул

Мы можем теперь перейти к количественному рассмотрению движения ядер в двухатомных молекулах. Поступательное движение молекулы как целого нас, естественно, интересовать не будет.

Движение ядер в молекуле зависит только от расстояния между ядрами. В адиабатическом приближении, в соответствии с уравнением (78,3), волновая функция удовлетворяет уравнению Шредингера, которое в сферических координатах имеет вид

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{1}{R^2}\frac{\partial}{\partial R}\left(R^2\frac{\partial}{\partial R}\right)+E_n(R)+\frac{\hbar^2\hat{K}^2}{2\mu R^2}\right\}\alpha_n=E\alpha_n, \tag{82,1}$$

где $E_n(R)$ — электронная энергия, а $\hat{K}$ — оператор момента ядер. Мы будем считать электронную энергию фиксированной и рассматривать ядра при заданном $E_n$. Тогда движение ядер сводится к вращению и колебаниям ядер около положения равновесия. Оператор момента ядер необходимо выразить через оператор полного момента молекулы, который можно представить для термов с равным нулю электронным спином в виде

$$\hat{J}=\hat{K}+\hat{L},$$

где $\hat{L}$ — момент системы электронов.

Очевидно, что молекула находится в состоянии с определенным значением полного момента. При этом момент ядер может пробегать ряд значений, отвечающих различным вращательным состояниям электронов. Поэтому нас будет

---

[1]) E. Wigner, E. Witmer, Zs. f. Phys. 51, 859 (1928).

интересовать лишь среднее значение величины

$$\overline{(\hat{\boldsymbol{K}})^2} = \overline{(\hat{\boldsymbol{J}} - \hat{\boldsymbol{L}})^2} = J^2 + \overline{(\hat{\boldsymbol{L}})^2} - 2\overline{\hat{\boldsymbol{J}}\hat{\boldsymbol{L}}},$$

поскольку $\hat{J}^2$ имеет определенное значение и сохраняется.

Согласно сказанному в § 78, сохраняется проекция момента электронов на ось молекулы $\boldsymbol{n}$, $L_z = \Lambda$.

Две другие проекции в среднем равны нулю

$$\overline{L}_x = 0, \quad \overline{L}_y = 0.$$

Кроме того, поскольку направление вектора $\boldsymbol{n}$ (ось молекулы) является единственным выделенным направлением, имеет место равенство

$$\overline{\hat{\boldsymbol{L}}} = \boldsymbol{n}\Lambda.$$

Вектор момента ядер в двухатомной молекуле перпендикулярен к $\boldsymbol{n}$, т. е.[1])

$$\hat{\boldsymbol{K}}\boldsymbol{n} = (\hat{\boldsymbol{J}} - \hat{\boldsymbol{L}}, \ \boldsymbol{n}) = 0,$$

откуда следует, что

$$\overline{\hat{\boldsymbol{J}}\boldsymbol{n}} = \overline{\hat{\boldsymbol{L}}\boldsymbol{n}} = \Lambda. \tag{82,2}$$

Из (82,2) получаем

$$\overline{\hat{\boldsymbol{J}}\hat{\boldsymbol{L}}} = \Lambda^2.$$

Окончательно находим

$$\overline{(\hat{\boldsymbol{K}})^2} = \hat{\boldsymbol{J}}^2 + \overline{\boldsymbol{L}}^2 - 2\Lambda^2 = J(J+1) + \overline{\boldsymbol{L}}^2 - 2\Lambda^2, \tag{82,3}$$

где квантовое число $J$ пробегает ряд целых значений

$$J \geqslant \Lambda.$$

В формуле (82,3) два последних слагаемых зависят только от состояния системы электронов, тогда как первое слагаемое характеризует вращение молекулы как целого.

Уравнение Шредингера приобретает вид

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{1}{R^2}\frac{\partial}{\partial R}\left(R^2\frac{\partial}{\partial R}\right) + E_n(R) + \frac{\hbar^2(\overline{\boldsymbol{L}}^2 - 2\Lambda^2)}{2\mu R^2} + \frac{\hbar^2 J(J+1)}{2\mu R^2}\right\}\alpha_n = E\alpha_n. \tag{82,4}$$

Обозначив

$$U(R) = E_n(R) + \frac{\hbar^2(\boldsymbol{L}^2 - 2\Lambda^2)}{2\mu R^2}, \tag{82,5}$$

мы видим, что $U(R)$ играет роль эффективной потенциальной энергии. Мы будем рассматривать состояния ядер, при которых

[1]) Это утверждение непосредственно следует из известного в классической механике факта — вектор момента в системе двух тел перпендикулярен к соединяющей их оси.

расстояние между ядрами остается близким к равновесному расстоянию $R_0$.

Тогда эффективную потенциальную энергию можно написать в виде

$$U(R) \cong U(R_0) + \left.\frac{d^2U}{dR^2}\right|_{R=R_0} \cdot \frac{(R-R_0)^2}{2} = U(R_0) + \frac{\mu\omega_0^2}{2}(R-R_0)^2,$$

где $\omega_0$ — частота колебаний. Уравнение (82,5) приобретает окончательно вид

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\partial}{\partial R}\left(R^2\frac{\partial}{\partial R}\right) + U(R_0) + \frac{\mu\omega_0^2}{2}(R-R_0)^2 + \right. \\ \left. + \frac{\hbar^2}{2\mu R_0^2}J(J+1)\right\}\alpha_n = E\alpha_n. \quad (82,6)$$

Мы видим, что в используемом адиабатическом приближении, при заданном электронном состоянии, движение молекулы сводится к вращению ее как целого и к гармоническим колебаниям.

Полная энергия молекулы дается формулой

$$E = E^{el} + \frac{\hbar^2}{2\mu R_0^2}J(J+1) + \hbar\omega_0\left(v + \frac{1}{2}\right), \quad (82,7)$$

где $v$ — вибрационное квантовое число.

Оценим еще степень точности адиабатического приближения. Согласно (57,6) параметр неадиабатичности по порядку величины равен

$$\hat{C}\alpha \sim \frac{\hbar^2}{\mu}\operatorname{grad}\alpha \int \varphi^* \operatorname{grad}\varphi\, dV. \quad (82,8)$$

Нас будет интересовать зависимость этого выражения от приведенной массы $\mu$. Оценим по порядку величины производную $\operatorname{grad}\alpha$ в основном колебательном состоянии. Очевидно, что

$$\operatorname{grad}\alpha \sim \frac{\alpha}{\sqrt{\overline{(R-R_0)^2}}}.$$

Чтобы оценить среднее смещение $\sqrt{\overline{(R-R_0)^2}}$, заметим, что в основном состоянии средняя потенциальная энергия равна половине полной энергии, т. е.

$$\frac{1}{2}\mu\omega_0^2\overline{(R-R_0)^2} = \frac{1}{2}\hbar\omega_0,$$

откуда

$$\sqrt{\overline{(R-R_0)^2}} \sim 1/\sqrt{\omega_0\mu}.$$

Таким образом,

$$\operatorname{grad}\alpha \sim \sqrt{\omega_0}\,\alpha\sqrt{\mu}.$$

Но по определению

$$\omega_0 = \sqrt{1/\mu\,(d^2U/dR^2)_{R=R_0}} \sim 1/\sqrt{\mu}.$$

Последний интеграл в (82,8) зависит только от электронной части системы и не зависит от $\mu$. Поэтому окончательно

$$C \sim 1/\mu^{3/4}.$$

Из соображений размерности следует, что

$$C \sim (m/\mu)^{3/4}. \tag{82,9}$$

Действительно, в полное уравнение Шредингера, описывающее движение всех частиц в молекуле, входят только две величины размерности массы — $\mu$ и массы электрона $m$. Никаких других величин размерности массы из величин, входящих в уравнение Шредингера, построить нельзя. Таким образом, параметр $C$ весьма мал даже для молекулы водорода. Величина $(m/\mu)^{3/4}$ является основным малым параметром теории молекул.

Расстояние между уровнями электронной энергии $\Delta E^{el}$ в молекулах не зависят от массы ядер и имеют тот же порядок величины, что и у атомов (т. е. порядка одного или нескольких электрон-вольт).

Расстояния между колебательными уровнями

$$\Delta E^{vib} = \hbar\omega_0 \sim \frac{1}{\sqrt{\mu}} \ll \Delta E^{el}.$$

Они составляют несколько десятых электрон-вольта.

Наконец, расстояние между ротационными уровнями

$$\Delta E^{rot} = \frac{\hbar^2}{2\mu R_0}\{J'(J'+1) - J(J+1)\},$$

где $\Delta J = J' - J = \pm 1$.

Поскольку $\Delta E^{rot} \sim \frac{1}{\mu}$, это расстояние гораздо меньше, чем расстояние между вибрационными уровнями, и составляет несколько милливольт.

Зная расположение уровней, можно найти спектр излучения (или поглощения) молекул, который по своему характеру резко отличается от атомных линейчатых спектров. При этом, однако, необходимо учесть одно важное обстоятельство. В гл. XII, посвященной теории излучения, будет показано, что переходы между уровнями ограничены так называемыми правилами запрета или отбора. Оказывается, что возможны переходы между уровнями, при которых происходит изменение квантовых чисел, определяемое условиями

$$J' \to \begin{cases} J+1 \\ J \\ J-1 \end{cases}$$

(кроме перехода $J' = J = 0$, который запрещен). В случае переходов, при которых электронное состояние молекулы не

изменяется, из (82,7) получаем

$$\hbar\omega = \hbar\omega_n(v' - v'') + B[J'(J'+1) - J''(J''+1)]. \quad (82,10)$$

Учитывая правила отбора, для заданной разности $v' - v''$ получаем две ветви частот. При $J'' = J' + 1$ имеем правую ветвь частот:

$$\hbar\omega_1 = \hbar\omega_n(v' - v'') - 2B(J'+1), \qquad J' = 0,\ 1,\ 2,\ \ldots \quad (82,11)$$

При $J'' = J' - 1$ находим вторую ветвь частот:

$$\hbar\omega_2 = \hbar\omega_n(v' - v'') + 2BJ', \qquad J' = 1,\ 2,\ 3,\ 4,\ \ldots \quad (82,12)$$

Заметим, что $J'$ не может равняться нулю, так как это соответствовало бы $J'' = -1$.

Рассмотрим порядок и расположение этих частот при заданной разности $v' - v''$. Частота $\omega_1$ уменьшается, начиная с $\omega_1 = \omega_n(v' - v'') - 2B$, а частота $\omega_2$ увеличивается с низшего значения, равного $\omega_n(v' - v'') + 2B$. Расстояние между линиями в каждой ветви равно $2B$. Расстояние же между ветвями равно $4B$. Частота $\omega_n(v' - v'')$, лежащая в середине, между полосами не наблюдается. Совокупность линий $\omega_1$ называют также $P$-ветвью частот, а совокупность частот $\omega_2$ составляет $R$-ветвь. Эти частоты лежат в инфракрасной части спектра.

Перейдем теперь к изучению частот, которые возникают при переходах, связанных с изменением электронного состояния. Характер такого спектра существенно отличается от разобранного нами инфракрасного спектра. Частоты излучения в этом случае определяются формулой

$$\hbar\omega = E_0 + \hbar\omega_n\left(v' + \frac{1}{2}\right) - \hbar\omega_m\left(v'' + \frac{1}{2}\right) + B_n(J'+1)J' - B_m J''(J''+1). \quad (82,13)$$

Здесь следует подчеркнуть, что $\omega_n \neq \omega_m$, а $B_n \neq B_m$. В самом деле, колебательные частоты $\omega$ и величины $B$ определяются электронным состоянием молекулы и, следовательно, при изменении этого состояния указанные величины существенно меняются.

Так как изменения энергии молекулы при переходах, связанных с изменением электронного состояния, достаточно велики, то наблюдаемые в этом случае частоты лежат в области видимого спектра. Совокупность линий, соответствующих выбранной паре квантовых чисел $v_l'$ и $v_l''$, называется полосой. Последняя в свою очередь составлена из трех ветвей. Эти ветви получаются следующим образом. В соответствии с правилом отбора квантовое число $J''$ может быть равно $J'' = J' - 1$; $J'' = J' + 1$ и $J'' = J'$. Первому случаю соответствует $R$-ветвь, частоты которой определяются соотношением

$$\omega_1 = A + \overline{B}J'^2 + CJ', \quad (82,14)$$

где

$$A = E_0 + \hbar\omega_n\left(v' + \frac{1}{2}\right) - \hbar\omega_n\left(v'' + \frac{1}{2}\right),$$

$$\overline{B} = B_n - B_m, \qquad C = B_n + B_m.$$

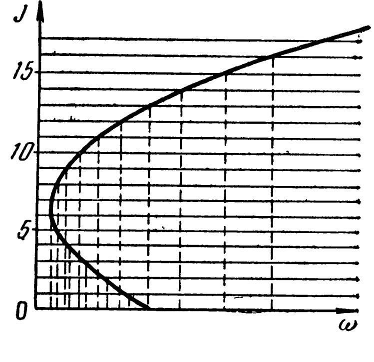
Переходы $J'' = J'$ составляют $Q$-ветвь, а частоты в этом случае определяются формулой

$$\hbar\omega_2 = A + \overline{B}J'(J'+1). \tag{82,15}$$

И, наконец, для $P$-ветви получаем

$$\hbar\omega_3 = A - 2B_m + \overline{B}J'^2 + (B_n - 3B_m)J'. \tag{82,16}$$

Во всех трех случаях $\omega$ является квадратичной функцией квантового числа $J$. Для того чтобы разобраться в расположении частот, удобно рассмотреть диаграмму на рис. 23. Здесь изображена парабола, соответствующая уравнению (82,16) при $\overline{B} > 0$. По вертикальной оси координат откладывается квантовое число $J$, по горизонтальной — частота $\omega$. Частоты, которые наблюдаются на опыте, могут быть легко получены с помощью этой диаграммы.



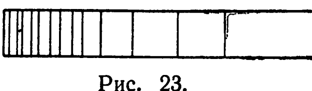



Рис. 23.

Если точки пересечения горизонтальных линий, проведенных через целые значения $J'$, и параболы проектировать на горизонтальную ось, то получим наблюдаемые значения частот. Эти частоты излучения расположены под горизонтальной осью. Мы видим, что частоты спектра расположены не на одинаковых расстояниях, как это имело место в инфракрасной части спектра, а сгущаются в некоторой его части; при увеличении $\omega$ наблюдаемые частоты начинают раздвигаться. Место сгущения линий называется головой или кантом полосы. В данном случае голова полосы расположена со стороны малых частот. Если $B_n < B_m$, то парабола выгибается в сторону. В этом случае кант полосы расположен в стороне больших частот. Следует, однако, отметить, что наблюдается много исключений из указанного правила. Именно в том случае, когда электронные термы вырождены, наблюдаются более чем три полосы, иногда, например, не наблюдается $Q$-ветвь и т. д.

ГЛАВА XI

# ТЕОРИЯ РАССЕЯНИЯ

## § 83. Амплитуда и сечение рассеяния

Процессом рассеяния мы будем называть отклонение частиц от первоначального направления движения, вызванное взаимодействием с некоторой системой, которую мы будем именовать рассеивателем.

Изучение процессов рассеяния заряженных и незаряженных частиц является одним из основных экспериментальных методов исследования строения атомов, атомных ядер и элементарных частиц.

Действительно, само существование атомного ядра было установлено в опытах Резерфорда по рассеянию $\alpha$-частиц. Анализ результатов наблюдения над рассеиванием нейтронов ядрами позволил Н. Бору сформулировать современные представления о строении ядра. Изучение законов рассеяния быстрых частиц является основным источником сведений о ядерных силах и о свойствах элементарных частиц.

Из приведенных, хотя и далеко не полных, примеров легко оценить значение теории рассеяния, которая является одним из важнейших разделов квантовой механики.

Рассеяние потока частиц характеризуется дифференциальным эффективным сечением рассеяния. Эта величина определяется как отношение числа частиц $dN_{\text{расс}}$, рассеянных в единицу времени в телесный угол $d\Omega$, к плотности потока $j_{\text{пад}}$ падающих частиц, т. е. дифференциальное эффективное сечение определяется соотношением

$$d\sigma(\theta, \varphi) = \frac{dN_{\text{расс}}(\theta, \varphi)}{j_{\text{пад}}},$$

где углы $\theta$ и $\varphi$ определяют направление движения рассеянных частиц. Ось $z$ направлена по движению падающих частиц.

Для наших целей удобно представить $dN_{\text{расс}}$ в виде

$$dN_{\text{расс}}(\theta, \varphi) = j_{\text{расс}}(\theta, \varphi)\, ds,$$

где $j_{\text{расс}}$ — плотность потока рассеянных частиц на больших расстояниях от рассеивающего центра, $ds$ — элемент площади, перпендикулярный радиусу-вектору, проведенному из рассеивающего центра под углами $\theta$, $\varphi$. Величина $ds$ связана с элементом телесного угла $d\Omega$ равенством

$$ds = r^2\, d\Omega.$$

Дифференциальное эффективное сечение, таким образом, определено формулой

$$d\sigma = \frac{j_{\text{расс}}}{j_{\text{пад}}}\, ds. \tag{83,1}$$

Это определение эффективного сечения совпадает с тем, которое было введено в § 43 ч. I.

В квантовой механике под плотностями потоков $j_{\text{расс}}$, $j_{\text{пад}}$ подразумеваются соответствующие плотности потоков вероятности.

При взаимном рассеянии двух квантовомеханических систем, например электрона атомом, нейтрона ядром, атома атомом и т. п., следует различать упругое и неупругое рассеяние. При упругом рассеянии внутреннее состояние как рассеивающей, так и рассеиваемой систем остается неизменным. Например, при упругом рассеянии электронов на атомах состояние последних остается неизменным. При неупругом рассеянии внутреннее состояние одной или обеих систем изменяется. Например, рассеяние электронов атомами является неупругим, если в процессе рассеяния атомы переходят в возбужденное состояние.

При неупругом рассеянии часть кинетической энергии переходит во внутреннюю энергию или, наоборот, внутренняя энергия переходит в кинетическую энергию. Столкновения последнего типа называют ударами второго рода.

Мы начнем изложение теории рассеяния с более простого случая упругого рассеяния. При упругом рассеянии можно не интересоваться внутренним состоянием систем и кратко именовать частицами любые взаимодействующие системы (хотя последние могут иметь сложное внутреннее строение, например являться атомами, молекулами или ядрами).

В процессе рассеяния имеет место взаимодействие двух частиц — рассеиваемой и рассеивающей. При этом очень часто энергия взаимодействия и зависит только от расстояния между частицами. В этом случае задача о движении двух взаимодействующих частиц всегда может быть сведена к изучению движения одной частицы (с приведенной массой $\mu$) в поле неподвижного центра сил и движению центра тяжести системы.

На практике всегда необходимо знать, как происходит процесс в лабораторной системе координат. Поэтому если задача о движении одной частицы в поле внешних сил решена, то

в окончательных формулах следует перейти к лабораторной системе. Это можно сделать легко, зная закон преобразования углов (см. § 43 ч. I)

$$\operatorname{tg} \theta_1 = \frac{m_1 \sin\theta}{m_1 + m_2 \cos\theta}; \quad \theta_2 = \frac{\pi - \theta}{2}. \tag{83,2}$$

Здесь $\theta$ — угол рассеяния двух частиц в системе центра инерции. $\theta_1$ и $\theta_2$ — углы рассеяния первой и второй частиц в лабораторной системе, в которой вторая частица до столкновения покоилась.

Перейдем к написанию волновой функции частицы, рассеивающейся на силовом центре. Мы не будем пока делать предположений о конкретном виде потенциальной энергии взаимодействия.

Поместим неподвижный рассеивающий центр в начало координат. Направление потока падающих частиц примем за ось $z$. Вдали от рассеивающего центра падающая частица движется как свободная, и ее волновая функция имеет вид плоской волны $e^{ikz}$. Вблизи силового центра частица испытывает рассеяние и вид ее волновой функции изменяется.

Однако после того, как рассеянная частица уйдет достаточно далеко от центра сил, она вновь будет двигаться как свободная. Так как поток рассеянных частиц на большом расстоянии всегда будет направлен от центра рассеяния, то движение рассеянных частиц должно описываться расходящейся волной $f(\theta, \varphi)\frac{e^{ikr}}{r}$.

Полную волновую функцию, описывающую движение падающей и рассеянной частиц на больших расстояниях от рассеивающего центра, можно представить в виде

$$\psi = e^{ikz} + f(\theta, \varphi)\frac{e^{ikr}}{r}, \tag{83,3}$$

где первый член описывает движение падающих частиц, а второй — рассеянных.

Амплитуда расходящейся волны $f(\theta, \varphi)$, именуемая амплитудой рассеяния, зависит, вообще говоря, от углов $\theta$ и $\varphi$. Согласно (83,1) следует вычислить плотности потоков падающих и рассеянных частиц. Плотность потока в плоской волне $e^{ikz}$, падающей на рассеивающий центр, в соответствии с формулой (7.6) равна $\frac{p}{m} = v$, где $v$ — скорость частицы. Плотность потока в расходящейся волне дается выражением

$$\frac{|f(\theta, \varphi)|^2 v}{r^2}. \tag{83,4}$$

Определяя отношение падающего и рассеянного потоков, получаем в соответствии с формулой (83,1) дифференциальное

эффективное сечение

$$d\sigma = |f(\theta, \varphi)|^2 d\Omega. \qquad (83,5)$$

Мы видим, таким образом, что эффективное сечение полностью определяется величиной амплитуды рассеяния. Вычисление последней производится обычно следующим образом. Находится решение уравнения Шредингера для движения частицы в поле рассеивающего центра, которое на больших расстояниях от центра имеет вид (83,3). Тогда коэффициент при множителе $\frac{e^{ikr}}{r}$ дает искомую амплитуду рассеяния.

Представление волновой функции, описывающей движение частицы вдали от рассеивающего центра в виде (83,3), т. е. в виде суммы падающей и расходящейся волн, было произведено на основании простых и наглядных физических соображений.

Можно, однако, строго показать, что вдали от неподвижного рассеивающего центра $U(\boldsymbol{r})$ решение уравнения Шредингера действительно может иметь вид (83,3). Для этого запишем уравнение Шредингера в виде

$$(\Delta + k^2)\psi = \frac{2mU}{\hbar^2}\psi,$$

где $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$, а $m$ и $E$ — соответственно масса и энергия рассеивающейся частицы. С помощью функции Грина решение можно (см. § 15) записать в форме

$$\psi = \psi_0 + \int G(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}')\frac{2m}{\hbar^2}U(\boldsymbol{r}')\psi(\boldsymbol{r}')\,dV', \qquad (83,6)$$

где функция $\psi_0$ удовлетворяет уравнению

$$(\Delta + k^2)\psi_0 = 0.$$

Решение последнего уравнения, очевидно, имеет вид плоской волны $e^{ikz}$.

Функция Грина удовлетворяет уравнению

$$(\Delta + k^2)G(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}') = \delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}').$$

Последнее уравнение формально идентично с уравнением (24,20) ч. I, если заменить в нем $\frac{\omega^2}{c^2}$ на $k^2$ и $-\frac{4\pi j}{c}$ на $\delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}')$. Не повторяя выкладок § 24 ч. I, воспользуемся формулой (24,22) ч. I и напишем решение для $G(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}')$ в виде

$$G(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}') = -\frac{1}{4\pi}\int \frac{\delta(\boldsymbol{r}'' - \boldsymbol{r}')\,e^{ik|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}''|}\,dV''}{|\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}''|}.$$

Выполняя интегрирование по $dV''$, получаем

$$G(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}') = -\frac{1}{4\pi}\frac{e^{ik|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}.$$

Подставляя в (83,6) значения $\psi$ и $G$, приходим к интегральному уравнению

$$\psi = e^{ikz} - \frac{m}{2\pi\hbar^2}\int \frac{e^{ik|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}U(\boldsymbol{r}')\,\psi(\boldsymbol{r}')\,dV'}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}. \qquad (83,7)$$

Рассмотрим далее интеграл, входящий в формулу (83,7), и определим его значения на больших расстояниях $r$. Определим большие расстояния следующим образом. Пусть область значений $\boldsymbol{r}'$, в которой подынтегральная функция заметно отлична от нуля и которая дает основной вклад в значение интеграла, имеет размеры $R$. Расстояния $|\boldsymbol{r}|$, для которых выполнено неравенство

$$|\boldsymbol{r}| \gg R, \qquad (83,8)$$

будем называть большими[1]). При вычислении интеграла (83,7) на больших расстояниях можно считать, что $|\boldsymbol{r}| \gg |\boldsymbol{r}'|$.

Разлагая $|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|$ в ряд, имеем

$$|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'| = \sqrt{(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')^2} = \sqrt{r^2 - 2\boldsymbol{r}\boldsymbol{r}'} = r - \frac{\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{r}'}{r}.$$

Подставляя это разложение в (83,7), находим

$$\psi = e^{ikz} - \frac{me^{ikr}}{2\pi\hbar^2 r}\int U(\boldsymbol{r}')\,e^{-i\boldsymbol{k}\boldsymbol{r}'}\psi(\boldsymbol{r}')\,dV'. \qquad (83,9)$$

Здесь обозначено

$$\boldsymbol{k} = \frac{k\boldsymbol{r}}{r}.$$

Волновой вектор $\boldsymbol{k}$ направлен, очевидно, по радиусу-вектору. Он характеризует направление распространения расходящейся шаровой волны. Сравнение (83,9) с (83,3) убеждает нас в том, что последнее выражение имеет общий характер. Амплитуда рассеяния при этом равна

$$f(\theta, \varphi) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int U(\boldsymbol{r}')\,\psi(\boldsymbol{r}')\,e^{-i\boldsymbol{k}\boldsymbol{r}'}\,dV'. \qquad (83,10)$$

Формулы (83,9) и (83,10) потребуются нам для дальнейшего.

## § 84. Формула Борна

Хотя нам удалось найти асимптотическое выражение волновой функции, задача о получении конкретного вида амплитуды

---

[1]) Такие расстояния всегда существуют при достаточно быстром убывании $U(r)$.

рассеяния еще далека от решения. Действительно, амплитуда рассеяния согласно формуле (83,10) выражается через неизвестную волновую функцию $\psi$. Точное решение уравнения Шредингера и нахождение $f(\theta, \varphi)$ в большинстве практически интересных задач сопряжено с огромными математическими трудностями. Поэтому в теории рассеяния широко применяются приближенные методы. Важнейшим из них является метод Борна. В основе этого метода лежит предположение о том, что потенциальная энергия взаимодействия рассеянной частицы с центром сил мала, так что ее можно рассматривать как малое возмущение.

Если потенциальная энергия является малым возмущением, то можно считать, что первоначальное движение частицы сравнительно мало изменяется. При этом интегральное уравнение (83,9) может быть без труда решено по методу последовательных приближений. В нулевом приближении малый член, содержащий потенциальную энергию, может быть опущен. Тогда

$$\psi_0 = e^{ikz} = e^{i\boldsymbol{k}_0\boldsymbol{r}}, \qquad (84,1)$$

Рис. 24.

где $\boldsymbol{k}_0$ — вектор, равный $\boldsymbol{k}_0 = k\boldsymbol{n}_0$; $\boldsymbol{n}_0$ — орт вдоль оси $z$. В первом приближении вместо волновой функции в правой части (83,9) должно быть подставлено значение ее нулевого приближения (84,1). Получаем

$$\psi = e^{ikz} - \frac{me^{ikr}}{2\pi\hbar^2 r}\int U(\boldsymbol{r}')\, e^{ikz' - i\boldsymbol{k}\boldsymbol{r}'}\, dV'. \qquad (84,2)$$

В этом приближении амплитуда рассеяния равна

$$f(\theta, \varphi) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int U(\boldsymbol{r}')\, e^{i\boldsymbol{K}\boldsymbol{r}'}\, dV'. \qquad (84,3)$$

При этом мы ввели обозначение

$$\boldsymbol{K} = \boldsymbol{k}_0 - \boldsymbol{k}, \qquad (84,4)$$

где модуль вектора $\boldsymbol{K}$ в соответствии с рис. 24 определяется соотношением

$$K = k\,|\boldsymbol{n} - \boldsymbol{n}_0| = 2k\sin\frac{\theta}{2} = \frac{2mv}{\hbar}\sin\frac{\theta}{2}. \qquad (84,5)$$

Вектор $\boldsymbol{K}$ часто называют вектором столкновений. Соответственно вектор $\boldsymbol{P} = \hbar\boldsymbol{K}$ носит название вектора передачи импульса. Если потенциальная энергия не зависит от углов $U = U(|\boldsymbol{r}|)$,

то в (84,3) можно выполнить интегрирование по углам:

$$f(\theta) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int\limits_0^\infty U(|\mathbf{r}'|)r'^2\,dr'\int\limits_0^\pi e^{iKr'\cos\vartheta}\sin\vartheta\,d\vartheta\int\limits_0^{2\pi}d\varphi =$$

$$= -\frac{2m}{\hbar^2}\int\limits_0^\infty U(|\mathbf{r}'|)\frac{\sin Kr'}{Kr'}r'^2\,dr'. \qquad (84,6)$$

В первом приближении амплитуда рассеяния определяется потенциальной энергией в первой степени. Тогда, если подставить (84,3) в определение (83,5), найдем

$$d\sigma = |f(\theta)|^2\,d\Omega = \frac{m^2}{4\pi^2\hbar^4}\left|\int U(|\mathbf{r}'|)\,e^{i\mathbf{K}\mathbf{r}'}\,dV'\right|^2 d\Omega =$$

$$= \frac{4m^2}{\hbar^4}\left|\int\limits_0^\infty U(|\mathbf{r}'|)\frac{\sin Kr'}{Kr'}r'^2\,dr'\right|^2 d\Omega. \qquad (84,7)$$

Выражение (84,7) носит название формулы Борна. Она находит широкое применение в ядерной физике.

Продолжая последовательные приближения, т. е. подставляя в (83,9) волновую функцию $\psi$ из (84,2), можно было бы найти волновую функцию и амплитуду рассеяния во втором приближении. Добавка к амплитуде рассеяния во втором приближении определялась бы интегралом от квадрата потенциальной энергии взаимодействия. Аналогично могут быть найдены поправки следующих порядков.

При малых значениях угла рассеяния имеем из (84,7)

$$d\sigma = \frac{4m^2}{\hbar^4}\left|\int\limits_0^\infty U(|\mathbf{r}'|)\,r'^2\,dr'\right|^2 d\Omega,$$

т. е. сечение оказывается не зависящим от скорости частицы. В следующем параграфе будет дан пример конкретного расчета сечения по формуле Борна. Перейдем теперь к обсуждению применимости формулы Борна.

Для быстрой сходимости ряда последовательных приближений нужно, чтобы поправка к волновой функции первого приближения $\psi_1$ была мала по сравнению с волновой функцией нулевого приближения $\psi_0$, т. е. должно выполняться условие

$$|\psi_1| \ll |\psi_0|. \qquad (84,8)$$

С помощью (83,7) можно найти значение функции $\psi_1$, справедливое при произвольных значениях $r$; тогда (84,8)

запишется в виде

$$\frac{m}{2\pi\hbar^2}\left|\int \frac{e^{ikz'}e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}U(\mathbf{r}')\,dV'}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}\right| \ll 1. \qquad (84,9)$$

Поскольку $\psi_1(\mathbf{r})$ убывает с увеличением расстояния от рассеивающего центра, то условие (84,9) будет выполнено, если оно выполняется в начале координат. Поэтому условие (84,9) можно заменить неравенством

$$|\psi_1(0)| = \frac{m}{2\pi\hbar^2}\left|\int \frac{e^{ik(r'+z')}U(r')\,dV'}{r'}\right| \ll 1. \qquad (84,10)$$

Дальнейшие оценки интеграла можно привести в двух предельных случаях:

1. При выполнении соотношений $kR \ll 1$, где $R$ — эффективный радиус взаимодействия. Это соответствует малым энергиям частиц

$$E \ll \frac{\hbar^2}{mR^2}.$$

2. При выполнении обратного неравенства $kR \gg 1$. Это соответствует условию

$$E \gg \frac{\hbar^2}{mR^2}.$$

В первом случае при оценке интеграла можно положить в (84,10) $e^{ik(r'+z')} \approx 1$.

Тогда (84,10) дает по порядку величины

$$\frac{m}{\hbar^2}\int \frac{|U(r')|\,dV'}{r'} \approx \frac{m}{\hbar^2}|U_0|R^2 \ll 1.$$

Здесь $U_0$ — некоторое среднее значение энергии взаимодействия в области $R$.

Запишем последнее соотношение в виде

$$U_0\Big/\frac{\hbar^2}{mR^2} \ll 1. \qquad (84,11)$$

Согласно (37,9) выражение $\frac{\hbar^2}{mR^2}$ по порядку величины равно минимальной глубине потенциальной ямы радиуса $R$, при которой возникает уровень. Мы видим, что условия применимости формулы Борна для рассеяния медленных частиц имеет простой смысл. Именно, средняя энергия взаимодействия должна быть мала по сравнению с минимальной потенциальной энергией частицы в яме, при которой образуется связанное состояние.

В случае большой энергии частицы область применимости формулы Борна значительно расширяется. Экспоненциальный

множитель в формуле (84,10) весьма быстро осциллирует, что приводит к уменьшению общего значения интеграла.

При вычислении интеграла можно вывести медленно изменяющиеся множители за знак интеграла, написав

$$|\psi_1(0)| \approx \frac{m}{2\pi\hbar^2}|U_0|\left|\int\int \frac{e^{ikz'}e^{ikr'}\,dV'}{r'}\right| = \\ = \frac{m|U_0|}{\hbar^2}\left|\int_0^R\int_0^\pi e^{ikr'(1+\cos\theta)}\sin\theta\,d\theta r'\,dr'\right| = \\ = \frac{m|U_0|}{\hbar^2 k}\left|\int_0^R (1-e^{2ikr'})\,dr'\right| \approx \frac{m|U_0|R}{\hbar^2 k} \ll 1.$$

При этом мы опустили интеграл от быстро осциллирующей величины $e^{2ikr'}$, как малый по сравнению с оставленным.

Переписав последнее неравенство в виде

$$\frac{|U_0|R}{\hbar v} \ll 1, \tag{84,12}$$

мы видим, что формула Борна справедлива для частиц, имеющих тем более высокую энергию, чем больше произведение $U_0R$, определяющееся свойствами рассеивающегося центра.

В важном случае кулоновского поля потенциал $\frac{Ze^2}{r}$ спадает так медленно, что нельзя ввести понятие об эффективном размере области взаимодействия $R$.

Однако заметим, что при $U_0 = \frac{Ze^2}{R}$ входящее в неравенство (84,12) произведение $U_0R$ от $R$ не зависит.

Поэтому в кулоновском поле неравенство (84,12) приобретает вид

$$\frac{Ze^2}{\hbar v} \ll 1. \tag{84,13}$$

Неравенство (84,13) имеет наглядный смысл: если ввести скорость электрона на первой боровской орбите водородоподобного атома с зарядом ядра $Ze$ — величину $v_k = \frac{Ze^2}{\hbar}$, то формула (84,13) приобретает вид

$$\frac{v_k}{v} \ll 1, \tag{84,14}$$

т. е. скорость частицы должна быть велика по сравнению со скоростью электрона на первой боровской орбите.

Неравенство (84,13) требует для применимости формулы Борна тем бóльших энергий, чем больше заряд рассеивающего ядра.

## § 85. Рассеяние быстрых заряженных частиц атомами

Применим формулу Борна к вычислению эффективного сечения рассеяния быстрых заряженных частиц атомами.

Будем считать, что ядро атома с зарядом $Ze$ находится в начале координат, заряд атомной оболочки распределен в пространстве с плотностью $n(\boldsymbol{r})$. Размерами ядра будем пренебрегать и считать его точечным.

Дифференциальное эффективное сечение рассеяния дается формулой (84,6), которая при $U = e\varphi$, где $e$ — заряд, $\varphi$ — потенциал электрического поля, действующего на рассеивающуюся частицу, приобретает вид

$$d\sigma = \frac{m^2 e^2}{4\pi^2 \hbar^4} \left| \int \varphi(\boldsymbol{r}') e^{i\boldsymbol{K}\boldsymbol{r}'} dV' \right|^2 d\Omega. \tag{85,1}$$

Интеграл в формуле (85,1) удобно выразить через распределение плотности заряда в атоме.

Для этого заметим, что $\int \varphi(\boldsymbol{r}') e^{i\boldsymbol{K}\boldsymbol{r}'} dV'$ представляет собой компоненту Фурье от потенциала. Она может быть выражена через компоненту Фурье от плотности заряда аналогично формуле (24,25) ч. I, связывающей компоненту Фурье плотности тока с компонентой Фурье потенциала.

Тогда имеем

$$d\sigma = \frac{4m^2 e^2}{\hbar^4 K^4} \left| \int \rho(r') e^{i\boldsymbol{K}\boldsymbol{r}'} dV' \right|^2 d\Omega. \tag{85,2}$$

Плотность заряда в атоме можно написать в виде

$$\rho(\boldsymbol{r}) = Ze\delta(\boldsymbol{r}) - en(\boldsymbol{r}). \tag{85,3}$$

Для дифференциального сечения получаем окончательно:

$$d\sigma = \frac{4n^2 e^4}{\hbar^4 K^4} \left| \int Z e^{i\boldsymbol{K}\boldsymbol{r}'} \delta(\boldsymbol{r}') dV' - \int n(\boldsymbol{r}') e^{i\boldsymbol{K}\boldsymbol{r}'} dV' \right|^2 d\Omega =$$

$$= \frac{4m^2 e^2}{\hbar^4 K^4} \left| Z - F(K) \right|^2 d\Omega, \tag{85,4}$$

где

$$F(K) = \int n(\boldsymbol{r}') e^{i\boldsymbol{K}\boldsymbol{r}'} dV'. \tag{85,5}$$

Величина $F$ называется атомным формфактором. Ее значение определяется распределением плотности электронного заряда.

Подставляя в (85,5) значение вектора столкновения $\boldsymbol{K}$ согласно (84,7), перепишем дифференциальное эффективное сечение в форме

$$d\sigma = \left( \frac{e^2}{2mv^2} \right)^2 \left| Z - F(K) \right|^2 \frac{d\Omega}{\sin^4 \frac{\theta}{2}}. \tag{85,6}$$

Рассмотрим вначале частный случай формулы (85,6). Если рассеяние происходит на точечном ядре, лишенном электронной оболочки $n=0$, то, следовательно, $F=0$. Тогда получаем для дифференциального эффективного сечения:

$$d\sigma = \left(\frac{Ze^2}{2mv^2}\right)^2 \frac{d\Omega}{\sin^4 \frac{\theta}{2}}. \qquad (85,7)$$

Мы приходим к известной формуле Резерфорда, которая получается также в классической механике. Формула Резерфорда в данном случае получена с помощью приближенного метода Борна. Интересно, однако, отметить, что при точном решении задачи[1]) получается то же самое выражение. Так как эффективное сечение рассеяния при точном решении не содержит постоянную Планка $\hbar$, то результаты, даваемые классической и квантовой физикой, естественно, должны совпадать.

Обращение сечения в бесконечность при рассеянии на бесконечномалые углы связано с медленным изменением кулоновского потенциала. Поэтому частицы рассеиваются, как бы далеко они ни пролетали от центра рассеяния. В действительности, однако, экранирующее действие электронной оболочки обеспечивает, как мы увидим дальше, конечное значение сечения рассеяния.

Рассмотрим теперь атомный формфактор (85,5). Эффективная область интегрирования в нем имеет размер порядка размера атома $a$. Вне этой области $n(r)$ обращается в нуль. Поэтому при малых углах $\theta$, при которых $Ka \ll 1$, в интеграле (85,5) можно разложить экспоненту в ряд. Тогда имеем

$$Z - F(K) = Z - Z - i\mathbf{K}\int n(\mathbf{r}')\,\mathbf{r}'\,dV' + \frac{1}{2}\int n(\mathbf{r}')(\mathbf{K}\mathbf{r}')^2\,dV'. \qquad (85,8)$$

В формуле (85,8) два первых члена взаимно сокращаются, так как заряд электронной оболочки атома равен заряду ядра. Третий член представляет дипольный момент атома, который, как мы видели (см. § 72), равен нулю. В последнем члене, интегрируя по углам, получаем

$$Z - F = \frac{2\pi K^2}{3}\int_0^\infty n(|\mathbf{r}|)\,r^4\,dr.$$

Дифференциальное эффективное сечение в предельном случае $Ka \ll 1$ будет иметь вид

$$d\sigma = \left(\frac{4\pi me^2}{3\hbar^2}\right)^2 \left|\int n(r)\,r^4\,dr\right|^2 d\Omega.$$

[1]) См., например, Н. Мотт и Г. Месси, Теория атомных столкновений, «Мир», 1969, стр. 57.

Таким образом, благодаря экранированию заряда электронной оболочкой дифференциальное эффективное сечение при малых углах рассеяния оказывается конечной и постоянной (не зависящей от углов) величиной. Наоборот при больших углах рассеяния, когда выполнено обратное неравенство $Ka \gg 1$, экспонента в интеграле (85,5) начинает быстро осциллировать и формфактор оказывается малой величиной. Пренебрегая им по сравнению с $Z$, мы приходим к (85,7). Экранирование заряда ядра не проявляется при больших углах рассеяния.

В качестве примера вычислим формфактор для атома водорода. Плотность заряда в атоме водорода в основном состоянии согласно (§ 38) равна

$$n(r) = |\psi(r)|^2 = \frac{1}{\pi a^3} e^{-\frac{2r}{a}}, \qquad a = \frac{\hbar^2}{me^2}.$$

Следовательно, формфактор определяется интегралом

$$F(K) = \frac{1}{\pi a^3} \int e^{-\frac{2r}{a}} e^{iKr} r^2\, dr \sin\theta\, d\theta\, d\varphi. \tag{85,9}$$

Направив ось $z$ вдоль вектора $\boldsymbol{K}$, имеем

$$F(K) = \frac{1}{\pi a^3} \int e^{-\frac{2r}{a}} e^{iKr\cos\theta} r^2\, dr \sin\theta\, d\theta\, d\varphi.$$

Произведя интегрирование, находим окончательно:

$$F(K) = \frac{16}{(4 + K^2a^2)^2}.$$

При этом дифференциальное эффективное сечение для атома водорода может быть написано в виде

$$d\sigma = \left(\frac{e^2}{2mv^2}\right)^2 \left[1 - \frac{16}{(4 + K^2a^2)^2}\right]^2 \frac{d\Omega}{\sin^4\frac{\theta}{2}}.$$

Полное сечение получается интегрированием по всем значениям угла рассеяния.

Для других атомов периодической системы элементов плотность заряда и потенциал взаимодействия рассеиваемой частицы с атомом могут быть вычислены с помощью приближенных методов Хартри или Томаса — Ферми. После этого можно производить расчет формфактора в соответствии с формулой (85,5).

## § 86. Фазовая теория рассеяния

В предыдущих параграфах мы рассматривали один из вариантов приближенной теории рассеяния.

Наряду с приближенной теорией оказывается возможным развить точную теорию рассеяния, часто именуемую фазовой

теорией. В точной теории рассеяния не делается никаких упрощающих предположений относительно характера взаимодействия частиц с рассеивающим центром. Поэтому эта теория применима при любых энергиях рассеивающихся частиц. Однако, как мы увидим ниже, в точной теории эффективное сечение выражается в виде бесконечных рядов, не всегда пригодных для практического использования.

Общая схема фазовой теории рассеяния не отличается от принятой в § 83. Рассмотрим движение частицы в поле рассеивающего центра. Будем считать рассеивающее поле сферически-симметричным и предположим, что вдали от центра падающая частица описывается плоской волной $e^{ikz}$, а рассеянная — расходящейся шаровой волной. Пусть найдено общее решение уравнения Шредингера в поле с центральной симметрией. Вдали от рассеивающего центра найденное решение следует представить в виде (83,3), т. е. в виде падающей плоской и расходящейся шаровой волны. Амплитуда последней, как мы знаем, определяет интересующее нас эффективное сечение рассеяния.

Согласно (35,31) общее решение уравнения Шредингера в поле с центральной симметрией, не зависящее от угла $\varphi$ может быть представлено разложением

$$\psi = \sum_{l=0}^{\infty} A_l R_l(r) P_l(\cos\theta). \tag{86,1}$$

Каждый из членов ряда (86,1) мы будем именовать $l$-й парциальной волной. Вдали от центра сил асимптотический вид радиальных функций $R_l$ дается формулами (35,25)—35,27):

$$R_l = B_l \frac{\sin\left(kr + \delta_l - \frac{\pi l}{2}\right)}{kr} = B_l \frac{e^{i\left(kr+\delta_l-\frac{\pi l}{2}\right)} - e^{-i\left(kr+\delta_l-\frac{\pi l}{2}\right)}}{2ikr}. \tag{86,2}$$

Напомним (ср. § 36), что если потенциальная энергия $U(r)$ равна нулю во всем пространстве, то совокупность фаз $\delta_l$ также обращается в нуль. Нужное нам асимптотическое выражение для $\psi$ при движении частицы в потенциальном поле $U(r)$ может быть записано в следующем виде:

$$\psi = \sum_{l=0}^{\infty} C_l P_l(\cos\theta) \frac{e^{i\left(kr+\delta_l-\frac{\pi l}{2}\right)} - e^{-i\left(kr+\delta_l-\frac{\pi l}{2}\right)}}{2ikr}. \tag{86,3}$$

Выражение (83,3) следует теперь представить в виде (86,3). Это позволит связать коэффициенты $C_l$ и фазы $\delta_l$ с амплитудой рассеяния $f(\theta)$. Проще всего привести (83,3) к виду (86,3), разложив выражение (83,3) в ряд по полиномам Лежандра. При этом нам понадобится разложение плоской волны $e^{ikz}$ только

на больших расстояниях, которое можно найти очень просто. Запишем плоскую волну в виде

$$e^{ikz} = e^{ikr\cos\theta} = \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1) P_l(\cos\theta) G_l(r), \tag{86,4}$$

где $G_l(r)$ — неизвестная функция радиуса. Умножая последнее равенство на $P_{l'}(\cos\theta)\sin\theta$ и интегрируя по $\theta$, найдем

$$\frac{1}{2i^l}\int_{-1}^{+1} e^{ikrx} P_l(x)\,dx = G_l(r). \tag{86,5}$$

Мы использовали условия ортогональности и нормировки полиномов Лежандра

$$\int_{-1}^{+1} P_l^2(x)\,dx = \frac{2}{2l+1}.$$

Интегрируя левую часть (86,5) по частям, имеем

$$G_l(r) = \frac{i^{-l}}{2ikr} e^{ikrx} P_l(x)\Big|_{x=-1}^{x=1} + \text{члены порядка } \frac{1}{r^2}.$$

Используя, наконец, известное свойство полиномов Лежандра $P_l(1) = 1$; $P_l(-1) = (-1)^l$, получаем для функции $G_l(r)$ на больших расстояниях:

$$G_l(r) = \frac{\sin\left(kr - \frac{\pi l}{2}\right)}{kr}.$$

Таким образом, разложение плоской волны на больших расстояниях представляется в виде

$$e^{ikz} = \sum_l i^l (2l+1) P_l(\cos\theta) \frac{\sin\left(kr - \frac{\pi l}{2}\right)}{kr}. \tag{86,6}$$

Разложим также $f(\theta)$ в ряд по полиномам Лежандра

$$f(\theta) = \sum_{l=0}^{\infty} D_l P_l(\cos\theta). \tag{86,7}$$

Подставляя в (83,3) ряды (86,6) и (86,7) и приравнивая найденное выражение и асимптотическое выражение (86,3), имеем

$$\sum_l C_l \frac{P_l(\cos\theta)}{2ikr}\left(e^{i\left(kr-\frac{\pi l}{2}+\delta_l\right)} - e^{-i\left(kr-\frac{\pi l}{2}+\delta_l\right)}\right) =$$

$$= \sum_l \left[\frac{i^l(2l+1)}{2ikr}\left(e^{i\left(kr-\frac{\pi l}{2}\right)} - e^{-i\left(kr-\frac{\pi l}{2}\right)}\right) + D_l\frac{e^{ikr}}{r}\right] P_l(\cos\theta). \tag{86,8}$$

Для выполнения равенства (86,8) при произвольных значениях угла $\theta$ необходимо, чтобы были равны между собой коэффициенты при каждом из полиномов $P_l$. Приравнивая эти коэффициенты, находим

$$\frac{C_l}{2ikr}\left[e^{i\left(kr-\frac{\pi l}{2}+\delta_l\right)}-e^{-i\left(kr-\frac{\pi l}{2}+\delta_l\right)}\right]=$$
$$=\frac{i^l(2l+1)}{2ikr}\left(e^{i\left(kr-\frac{\pi l}{2}\right)}-e^{-i\left(kr-\frac{\pi l}{2}\right)}\right)+D_l\frac{e^{ikr}}{r}. \qquad (86,9)$$

Последнее соотношение должно выполняться при произвольном значении радиуса $r$. Это означает, что коэффициенты у экспонент с одинаковыми показателями должны быть равны между собой. Отсюда находим следующее соотношение между коэффициентами:

$$C_l=i^l(2l+1)e^{i\delta_l},$$
$$i^l(2l+1)+2ikD_le^{\frac{i\pi l}{2}}=C_le^{i\delta_l}. \qquad (86,10)$$

Находя отсюда $D_l$ и подставляя в разложение (86,7), получим для амплитуды рассеяния выражение

$$f(\theta)=\frac{1}{2ik}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\left[e^{2i\delta_l}-1\right]P_l(\cos\theta). \qquad (86,11)$$

Дифференциальное эффективное сечение будет, следовательно, равно

$$d\sigma=\frac{1}{4k^2}\left|\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\left(e^{2i\delta_l}-1\right)P_l(\cos\theta)\right|^2 d\Omega. \qquad (86,12)$$

Полное эффективное сечение найдем, интегрируя (86,12) и учитывая соотношения ортогональности для полиномов Лежандра. Простое вычисление дает:

$$\sigma=\sum_{l=0}^{\infty}\frac{4\pi}{k^2}(2l+1)\sin^2\delta_l. \qquad (86,13)$$

Мы видим, что дифференциальное эффективное сечение и полное сечение рассеяния частицы в заданном поле сил выражаются через совокупность фаз $\delta_l$. Отсюда следует, что для вычисления сечений рассеяния необходимо найти решение уравнения Шредингера (35,8) для частицы, движущейся в данном силовом поле. Определяя вид решения на больших расстояниях и сравнивая его с (86,2), находим $\delta_l$.

Точное решение уравнения Шредингера позволяет найти все бесконечное множество фаз $\delta_l$ и, следовательно, значение сечения рассеяния. Точная или фазовая теория рассеяния была впервые развита Рэлеем, изучавшим рассеяние звуковых волн. Для решения задач квантовой механики метод Рэлея был впервые использован Факсеном и Хольцмарком.

Из (86,13) видно, что полное эффективное сечение можно представить в виде суммы так называемых парциальных сечений

$$\sigma = \sum_{l=0} \sigma_l, \qquad \sigma_l = \frac{4\pi}{k^2}(2l+1)\sin^2\delta_l.$$

Каждое из парциальных сечений отвечает учету одного из членов ряда (86,2):

$$B_l P_l(\cos\theta)\,\frac{\sin\left(kr - \frac{\pi l}{2} + \delta_l\right)}{kr}.$$

Ясно, что он описывает состояние частицы с определенным моментом $L^2 = \hbar^2 l(l+1)$. По этой причине в теории рассеяния приняты обозначения, аналогичные обозначениям атомных термов. Например, $l = 0$ отвечает $S$-рассеяние, которое характеризуется парциальным сечением $\sigma_0$; $l = 1$ отвечает $P$-рассеяние с парциальным сечением $\sigma_1$ и т. д.

Полный поток частиц в состоянии с моментом $L$ через произвольную поверхность, окружающую рассеивающий центр, равен нулю. Его можно было бы вычислить по общей формуле (7,3). Однако это видно и без проведения расчета, на основании общей теоремы, приведенной в § 7. Там было указано, что полный поток всегда равен нулю в случае вещественной волновой функции. В нашем случае это именно так, поскольку волновая функция выражается формулой (86,2).

Равенство нулю полного потока рассеиваемых частиц имеет очевидный смысл — оно означает закон сохранения числа частиц в процессе рассеяния. Важно при этом заметить, что закон сохранения имеет место для частиц с каждым значением $l$ порознь. К обсуждению этого обстоятельства мы вернемся еще в § 91.

Нахождение последовательности всех фаз $\delta_l$ является, как правило, весьма сложной задачей. Кроме того, практическая ценность формул, представляемых в виде рядов, невелика, если только ряды не обладают достаточно быстрой сходимостью. Мы не можем здесь останавливаться на вопросах сходимости рядов (86,12) и (86,13) и приведем лишь окончательный результат[1].

---

[1]) Л. Д. Ландау и Е. М. Лифшиц, Квантовая механика, Физматгиз, 1963, стр. 547.

Для сходимости ряда (86,13) требуется, чтобы потенциальная энергия $U(r)$ на бесконечности убывала быстрее, чем по закону $\frac{1}{r^n}$, где $n > 2$. Далее, ряд для дифференциального эффективного сечения расходится при $\theta = 0$, если $U(r)$ на больших расстояниях имеет вид $\frac{1}{r^n}$, где $n \leqslant 3$. При $r \to 0$ $U(r)$ должна расти медленнее, чем $1/r^2$.

Практическая ценность формул (86,12) и (86,13) для эффективного сечения рассеяния тем выше, чем меньше число членов ряда играет существенную роль. Простое рассуждение показывает, что по мере увеличения энергии частицы растет число фаз $\delta_l$, которое необходимо учитывать в рядах (86,12)—(86,13).

Действительно, пусть $R$ — радиус области, в которой энергия взаимодействия существенно отлична от нуля. При достаточно быстром убывании $U(r)$ введение такой величины всегда возможно. Волновая функция $R_l$ имеет первый максимум на расстоянии $r$, определяемом из соотношения $kr \sim l$. В последующих максимумах $R_l$ имеет значительно меньшую величину из-за убывания множителя $\frac{1}{r}$.

При малых значениях $r$ волновая функция также мала. Таким образом, волновая функция $R_l$ имеет основное значение при $r \sim \frac{l}{k}$. Если $r \sim \frac{l}{k} > R$, то в области взаимодействия волновая функция мала. Но в этом случае будет мала и амплитуда рассеяния. Таким образом, испытывают эффективное рассеяние только те частицы, у которых $\frac{l}{k} \leqslant R$.

С ростом энергии частицы растет момент $l$ эффективно рассеивающихся частиц. При малых энергиях число членов, которые следует учитывать в разложениях (86,12)—(86,13), сравнительно невелико. Поэтому фазовая теория рассеяния особенно важна для изучения рассеяния медленных частиц. Это качественное рассуждение можно заменить количественным правилом, которое мы приведем без доказательства.

Если классическая частица, имеющая импульс $p$ и прицельное расстояние

$$\rho_l = \frac{\hbar\sqrt{l(l+1)}}{p} = \frac{\sqrt{l(l+1)}}{k}, \tag{86,14}$$

при движении не проникает в область, где потенциальная энергия взаимодействия частиц заметно отлична от нуля, то соответствующая моменту $\hbar^2 l(l+1)$ фаза $\delta_l$ мала[1]).

---

[1]) Вывод этого утверждения дан в книге: Н. Мотт и Г. Месси, Теория атомных столкновений, «Мир», 1969, стр. 32.

Применим это правило к исследованию рассеяния медленной частицы. Пусть рассеивающий центр создает поле, эффективное действие которого простирается на область $R$. Под медленными мы будем понимать частицы с волновым числом $k$, для которого $kR \ll 1$.

В этом случае

$$\rho_l > R, \tag{86,15}$$

для всех значений $l > 0$. Все фазы, кроме $\delta_0$, малы. Мы видим, таким образом, что для рассеяния медленных частиц существенную роль играет только $S$-рассеяние.

Дифференциальное эффективное сечение при этом равно

$$d\sigma = \frac{1}{4k^2} \mid e^{2i\delta_0} - 1 \mid^2 d\Omega = \frac{\sin^2 \delta_0}{k^2} d\Omega, \tag{86,16}$$

поскольку $P_0(0) = 1$.

Эффективное сечение $S$-рассеяния не зависит от угла рассеяния. Это означает, что рассеяние является сферически-симметричным. С увеличением энергии частицы начинают играть роль фазы более высокого порядка и рассеяние постепенно приобретает все более асимметричный характер.

При больших энергиях эффективное сечение становится существенно отличным от нуля только для очень малых углов $\theta$. Это лучше всего можно увидеть с помощью формулы Борна (84,3). При больших энергиях вектор $\boldsymbol{K}$ велик, интеграл быстро осциллирует, и поэтому эффективное сечение мало́. При $\theta = 0$ вектор $\boldsymbol{K}$ равен нулю и осцилляция отсутствует, а эффективное сечение велико. Заметим, наконец, что фазовая теория рассеяния в том виде, как она изложена здесь, неприменима к рассеянию в кулоновском поле. Волновая функция в этом случае не имеет асимптотического вида (83,3). Это обстоятельство связано с очень медленным падением кулоновского потенциала как функции расстояния. Указанный случай требует особого рассмотрения [1]).

## § 87. Рассеяние сферической потенциальной ямой (понятие о резонансном рассеянии)

В качестве примера использования фазовой теории рассеяния рассмотрим рассеяние частицы в потенциальном поле, которое определим следующим образом:

$$\begin{aligned} U &= -U_0 \quad \text{при} \quad r < R, \\ U &= 0 \quad\quad\; \text{при} \quad r > R. \end{aligned} \tag{87,1}$$

[1]) Точное решение этой задачи см., например в книге Л. Д. Ландау и Е. М. Лифшиц, Квантовая механика, Физматгиз, 1963, стр. 597.

Для простоты мы ограничимся случаем, когда рассеиваемая частица имеет малую энергию, т. е. $kR \ll 1$, $E \ll U_0$. В этом случае, как мы знаем, существенно $S$-рассеяние, и нам потребуется определить только фазу $\delta_0$. В случае потенциального поля, заданного формулой (87,1), решение задачи не представляет труда. С помощью найденных соотношений мы сможем проиллюстрировать также весьма интересное явление, возникающее в процессе рассеяния, так называемое резонансное рассеяние. Оно заключается в том, что эффективное сечение рассеяния при известных условиях оказывается весьма большим. Этот эффект имеет место тогда, когда в потенциальном поле существует уровень энергии, близкий к нулю, а энергия рассеиваемой частицы достаточно мала.

Представим волновую функцию в виде $\psi = A_0 R_0(r) = \frac{\chi}{r}$. Функция $\chi(r)$ удовлетворяет уравнению

$$\frac{d^2\chi}{dr^2} + k^2\chi = 0 \quad \text{при} \quad r > R, \tag{87,2}$$

$$\frac{d^2\chi}{dr^2} + \beta^2\chi(r) = 0 \quad \text{при} \quad r < R, \tag{87,3}$$

где

$$\beta^2 = \frac{2m(E + U_0)}{\hbar^2}.$$

Вид функции $\chi$ при $r > R$ легко получается из решения уравнения (87,2):

$$\chi = C\sin(kr + \delta_0). \tag{87,4}$$

В общем случае функция $\chi$ имеет вид (87,4) только на больших расстояниях [ср. с формулой (86,2)]. Однако в нашем случае в силу резкой границы потенциальной энергии функция $R_0$ имеет вид (86,2) на всех расстояниях $r > R$.

При $r < R$ получаем

$$\chi = A\sin\beta r + B\cos\beta r,$$

где $A$ и $B$ — постоянные. Функция $R_0$ должна оставаться конечной при $r \to 0$. Поэтому коэффициент $B$ следует положить равным нулю. Таким образом, получаем

$$\chi = A\sin\beta r \quad \text{при} \quad r < R.$$

В точке $r = R$ функция $\psi$ и ее первая производная должны быть непрерывны. Эти два соотношения удобно заменить равенством логарифмических производных. Тогда найдем

$$\beta\operatorname{ctg}\beta R = k\operatorname{ctg}(kR + \delta_0). \tag{87,5}$$

Мы, таким образом, получили трансцендентное уравнение для фазы $\delta_0$. Предположим вначале, что фаза $\delta_0$ мала. Тогда $\operatorname{ctg}(kR + \delta_0)$ можно разложить в ряд по малому аргументу

$kR+\delta_0$. Имеем в результате:

$$\beta \operatorname{ctg} \beta R = \frac{k}{kR+\delta_0},$$

откуда можно найти фазу $\delta_0$, которая равна

$$\delta_0 = \frac{k}{\beta \operatorname{ctg} \beta R} - kR. \tag{87,6}$$

Из соотношения (87,6) мы видим, что фаза действительно будет значительно меньше единицы, если выполняется соотношение

$$\frac{k}{\beta \operatorname{ctg} \beta R} \ll 1. \tag{87,7}$$

Дифференциальное эффективное сечение легко можно найти, используя формулу (86,16) и помня, что $\delta_0 \ll 1$. Оно имеет вид

$$d\sigma = \frac{\delta_0^2}{k^2}\, d\Omega = \frac{1}{k^2}\left(\frac{k}{\beta \operatorname{ctg} \beta R} - kR\right)^2 d\Omega.$$

Возможен, однако, такой вид потенциальной ямы, для которой $\beta \operatorname{ctg} \beta R$ приближается к нулю. В этом случае неравенство (87,7) нарушается, а фаза $\delta_0$ велика. Для того чтобы выяснить условия, при которых фаза $\delta_0$ велика, установим связь между величиной $\beta \operatorname{ctg} \beta R$, входящей в формулу (87,5), и уровнем энергии частицы, находящейся в связанном состоянии. В § 37 мы получили для уровней энергии частицы, находящейся в потенциальной яме, формулу (37,6),

$$\frac{2m(U_0-\varepsilon)}{\hbar^2} \operatorname{ctg}^2 \sqrt{\frac{2m(U_0-\varepsilon)R^2}{\hbar^2}} = \frac{2m\varepsilon}{\hbar^2}, \tag{87,8}$$

где $\varepsilon$ — уровень энергии частицы в яме. Если уровень энергии частицы в яме близок к нулю, т. е. $\varepsilon \ll U_0$, то соотношение (87,8) переписывается в виде

$$\frac{2mU_0}{\hbar^2} \operatorname{ctg}^2 \sqrt{\frac{2mU_0R^2}{\hbar^2}} = \frac{2m\varepsilon}{\hbar^2}. \tag{87,9}$$

В рассматриваемом случае энергия рассеиваемой частицы также невелика ($E \ll U_0$), поэтому соотношение (87,9) можно записать в форме

$$\beta^2 \operatorname{ctg}^2 \beta R = \frac{2m\varepsilon}{\hbar^2}. \tag{87,10}$$

Мы видим, таким образом, что рост фазы $\delta_0$ связан с наличием близко расположенного к нулю уровня энергии $\varepsilon$.

Перейдем теперь к вычислению фазы в том случае, когда соотношение (87,7) нарушается, а фаза $\delta_0$ велика. Обозначим это значение фазы через $\delta_{0.\,\text{р}}$. Найдем $\delta_{0.\,\text{р}}$ опять из соотношений

(87,5). Для этого $\operatorname{ctg}(kR+\delta_{\text{o. p}})$ разложим в ряд по малому параметру $kR$ и ограничимся нулевым членом разложения. При этом получим:

$$\beta \operatorname{ctg} \beta R = k \operatorname{ctg} \delta_{\text{o. p}}.$$

Возводя полученное соотношение в квадрат и используя формулу (87,10), найдем

$$\operatorname{ctg}^2 \delta_{\text{o. p}} = \frac{\varepsilon}{E}. \tag{87,11}$$

Мы видим теперь, что фаза $\delta_{\text{o. p}}$ не будет малой величиной, если $\varepsilon < E$.

Эффективное сечение рассеяния найдем с помощью общей формулы (86,16). Имеем в этом случае

$$\sigma_{\text{p}} = \frac{4\pi \sin^2 \delta_{\text{o. p}}}{k^2} = \frac{2\pi\hbar^2}{m(E+\varepsilon)}. \tag{87,12}$$

Последнее выражение носит название формулы Вигнера. Легко заметить, что эффективное сечение в случае резонанса значительно больше сечения в случае отсутствия последнего. Отношение сечений равно

$$\frac{\sigma_{\text{p}}}{\sigma} = \frac{\sin^2 \delta_{\text{o. p}}}{\delta_0^2}.$$

Так как $\delta_0 \ll 1$, а $\sin \delta_{\text{o. p}}$, как это видно из формулы (87,11), при $\varepsilon \approx E$ близок к единице, то очевидно, что

$$\frac{\sigma_{\text{p}}}{\sigma} \gg 1.$$

Мы получили формулу (87,12) для частного вида потенциальной энергии. Необходимо отметить, однако, что зависимость эффективного сечения от $\varepsilon$ (87,12) является общей и не связана с конкретным видом потенциальной энергии [1]).

Резонансное рассеяние имеет место и в том случае, когда система не имеет реального, близкого к нулю уровня, но конфигурация поля близка к той, при которой такой уровень появляется. Такой ситуации отвечает положительность функции $\operatorname{ctg} \beta R$, в то время как реальному уровню обязательно отвечает случай $\operatorname{ctg} \beta R < 0$ (см. § 37). Соотношение (87,10) содержит $\operatorname{ctg}^2 \beta R$ и поэтому выполняется независимо от знака функции $\operatorname{ctg} \beta R$. В том случае, когда $\operatorname{ctg} \beta R \geqslant 0$, рассеяние происходит не на реальном, а на виртуальном уровне.

---

[1]) Более общий вывод формулы для резонансного рассеяния см. в книге Л. Д. Ландау и Е. М. Лифшиц, Квантовая механика, Физматгиз, 1963, стр. 584.

С помощью полученных соотношений можно легко найти также дифференциальное эффективное рассеяние на потенциальном барьере, т. е. на потенциальном поле, имеющем следующий вид:

$$U = 0 \quad \text{при} \quad r > R,$$
$$U = |U_0| \quad \text{при} \quad r < R.$$

Для этого достаточно провести замену $\beta \to i\beta$. Тогда для дифференциального эффективного сечения получим

$$d\sigma = \frac{1}{|\beta|^2}(\operatorname{th}|\beta| R - |\beta| R)^2 \, d\Omega. \tag{87,13}$$

Формула (87,13) упрощается в случае бесконечно высокого потенциального барьера $U_0 \to \infty$. В этом случае для полного эффективного сечения найдем следующее выражение:

$$\sigma = 4\pi R^2. \tag{87,14}$$

Интересно заметить, что эффективное сечение рассеяния в этом случае в четыре раза больше геометрических размеров рассеивателя.

## § 88. Упругое рассеяние тождественных частиц

До сих пор мы предполагали, что рассеиваемая частица и рассеиватель являются различными частицами. Перейдем теперь к рассмотрению случая, когда рассеивающая и рассеиваемая частицы являются тождественными. Тождественность частиц, как мы сейчас увидим, существенно сказывается на процессе рассеяния. Мы начнем с рассмотрения частиц со спином, равным нулю. Предположим сначала, что тождественные частицы движутся навстречу друг другу с равными скоростями. В этом случае центр инерции системы покоится и волновая функция системы будет в соответствии с (14,14) иметь вид

$$\psi = \psi(x, y, z)$$

и зависеть только от относительных координат. Волновая функция $\psi_0(x, y, z)$ удовлетворяет уравнению

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta + U(r)\right]\psi = E\psi(x, y, z). \tag{88,1}$$

Приведенная масса двух одинаковых частиц равна $\mu = m/2$. Мы не можем для нашего случая писать волновую функцию в виде

$$\psi = e^{ikz} + \frac{f(\theta)}{r}e^{ikr},$$

так как эта функция не удовлетворяет требованиям симметрии.

В самом деле, перестановке двух частиц местами, т. е. замене $x_1 \to x_2$; $y_1 \to y_2$, $z_1 \to z_2$, соответствует согласно (14,6) преобразование $\boldsymbol{r} \to -\boldsymbol{r}$. При этом модуль вектора $\boldsymbol{r}$ не изменяется, а угол $\theta$ заменяется на $\pi - \theta$. Учитывая последнее преобразование, легко найти, что симметризованная волновая функция должна иметь вид

$$\psi_s = e^{ikz} + e^{-ikz} + \frac{e^{ikr}}{r}\left[f(\theta) + f(\pi - \theta)\right]. \qquad (88,2)$$

Расходящаяся волна опять описывает рассеянные частицы. Дифференциальное эффективное сечение рассеяния дается теперь выражением

$$d\sigma = |f(\theta) + f(\pi - \theta)|^2 d\Omega = |f(\theta) + f(\pi - \theta)|^2 \sin\theta \, d\theta \, d\varphi. \qquad (88,3)$$

Таким образом, мы нашли дифференциальное эффективное сечение процесса, при котором одна из сталкивающихся тождественных частиц рассеивается на угол $\theta$ по отношению к направлению первоначального полета.

Из формулы (88,3) следует, что число частиц, рассеянных на угол $\theta$ и на угол $\pi - \theta$, одинаково. Если одна из частиц до столкновения покоилась, то дифференциальное эффективное сечение в этой системе координат может быть найдено следующим образом. В системе координат, где центр инерции покоится, дифференциальное эффективное сечение дается выражением (88,3). Переход к лабораторной системе совершается с помощью формул (83,2). В данном случае масса частиц одинакова, и мы получаем

$$\operatorname{tg}\vartheta_1 = \frac{\sin\theta}{1 + \cos\theta} = \operatorname{tg}\frac{\theta}{2}$$

и соответственно

$$\vartheta_1 = \frac{\theta}{2}, \qquad \theta = 2\vartheta_1.$$

Выражая дифференциальное эффективное сечение как функцию угла $\vartheta_1$, находим

$$\begin{aligned} d\sigma &= |f(2\vartheta_1) + f(\pi - 2\vartheta_1)|^2 \, 4\cos\vartheta_1 \sin\vartheta_1 \, d\vartheta_1 \, d\varphi_1 = \\ &= |f(2\vartheta_1) + f(\pi - 2\vartheta_1)|^2 \, 4\cos\vartheta_1 \, d\Omega_1, \end{aligned} \qquad (88,4)$$

где $d\Omega_1$ — элемент телесного угла в лабораторной системе.

Выражение (88,4) дает дифференциальное эффективное сечение процесса, при котором одна из частиц рассеялась в элемент телесного угла $d\Omega_1$. Поскольку обе частицы тождественны, вопрос о том, какая именно частица движется в элементе угла $d\Omega_1$ первоначально двигавшаяся, или покоившаяся, лишен физического смысла.

В качестве примера применения формулы (88,4) рассмотрим столкновение двух тождественных частиц, у которых энергия взаимодействия имеет простейший вид

$$U = U_0 \quad \text{при} \quad r < R,$$
$$U = 0 \quad \text{при} \quad r > R.$$

Будем считать, что до столкновения одна из частиц покоилась, а другая — двигалась достаточно медленно, так, чтобы выполнялось соотношение $kR \ll 1$. В этом случае $\delta_l \ll 1$ и амплитуда рассеяния в соответствии с (86,11) может быть записана в виде

$$f(\theta) = \frac{\delta_0}{k}.$$

Для дифференциального эффективного сечения рассеяния в лабораторной системе получаем

$$d\sigma = |f(2\vartheta_1) + f(\pi - 2\vartheta_1)|^2 4 \cos\vartheta_1 \, d\Omega_1 = \frac{16\delta_0^2}{k^2} \cos\vartheta_1 \, d\Omega_1.$$

Мы видим, таким образом, что если в системе центра инерции рассеяние сферически-симметрично, то в лабораторной системе дифференциальное эффективное сечение пропорционально косинусу угла рассеяния.

Теория рассеяния тождественных частиц со спином, отличным от нуля, строится по такой же схеме, как и для частиц без спина. Для конкретности мы будем считать, что обе сталкивающиеся частицы имеют спин 1/2. Обобщение теории на случай произвольного спина не представляет труда.

Рассмотрим столкновение двух тождественных частиц в системе координат центра инерции в случае, когда полный спин системы равен нулю (т. е. спины частиц ориентированы антипараллельно). При этом спиновая часть волновой функции должна быть антисимметричной и, следовательно, координатная часть симметрична. Иными словами, координатную часть волновой функции можно, как и в случае частиц без спина, представить в виде

$$\psi_s = e^{ikz} + e^{-ikz} + \frac{e^{ikr}}{r}[f(\theta) + f(\pi - \theta)]. \tag{88,5}$$

Соответственно для дифференциального эффективного сечения рассеяния имеем

$$d\sigma_s = |f(\theta) + f(\pi - \theta)|^2 d\Omega. \tag{88,6}$$

Если полный спин равен единице (т. е. спины ориентированы параллельно), то спиновая часть волновой функции симметрична, а координатная антисимметрична. Поэтому для

последней можно написать асимптотическое выражение

$$\psi_a = e^{ikz} - e^{-ikz} + \frac{e^{ikr}}{r}[f(\theta) - f(\pi - \theta)]. \qquad (88,7)$$

При этом для дифференциального эффективного сечения получаем

$$d\sigma_a = |f(\theta) - f(\pi - \theta)|^2 d\Omega. \qquad (88,8)$$

Выше мы рассмотрели процессы, в которых рассеиваемые частицы имели определенную ориентацию спина. Однако часто при рассеянии частицы находятся в состоянии с неопределенным спином. В этом случае обычно интересуются средним эффективным сечением, которое получается при усреднении по всем возможным спиновым состояниям. Среднее сечение для частиц со спином $^1/_2$ легко может быть найдено из следующих соображений. Сталкивающиеся частицы могут находиться в четырех состояниях: в одном состоянии со спином 0 и в трех состояниях со спином 1 (три возможные проекции на ось $z$). Поскольку все эти состояния равновероятны, то состояние со спином 0 имеет статистический вес, равный $^1/_4$, а вес состояния со спином 1 равен $^3/_4$. Поэтому среднее дифференциальное эффективное сечение можно представить в виде

$$d\sigma = \frac{1}{4} d\sigma_s + \frac{3}{4} d\sigma_a. \qquad (88,9)$$

В качестве примера рассмотрим рассеяние двух медленных тождественных частиц со спином $^1/_2$, у которых энергия взаимодействия может быть записана в виде

$$U = U_0 \quad \text{при} \quad r < R,$$
$$U = 0 \quad \text{при} \quad r > R.$$

В случае параллельных спинов сечение рассеяния, даваемое выражением (88,8), оказывается равным нулю:

$$d\sigma_a = |f(\theta) - f(\pi - \theta)|^2 d\Omega = 0.$$

Следовательно, рассеяние частиц с параллельными спинами связано с эффектами старших порядков, т. е. $P$-, $F$- и т. д. рассеянием. Сечение рассеяния частиц с антипараллельными спинами при малых энергиях то же, что и у частиц со спином, равным нулю,

$$d\sigma_s = \frac{4\delta_0^2}{k^2} d\Omega.$$

Среднее эффективное сечение в соответствии с формулой (88,9) дается выражением

$$d\sigma = \frac{\delta_0^2}{k^2} d\Omega.$$

Мы видим, таким образом, что учет тождественности приводит к появлению существенной зависимости эффективного сечения рассеяния от взаимной ориентации их спинов.

Переход от сечений, вычисленных в системе координат центра инерции, к сечениям в лабораторной системе координат производится так же, как и у частиц без спина.

## § 89. Учет поляризации в процессах рассеяния

Все результаты, которые были получены ранее, относились к рассеянию пучков, в которых все частицы находились в одном и том же состоянии, т. е. описывались одной и той же волновой функцией. Однако частицы пучка могут находиться в разных спиновых состояниях. Мы ограничимся далее рассмотрением пучков, составленных из частиц со спином $1/2$, рассеиваемых на неполяризованных мишенях. Как известно, каждая из частиц пучка описывается двухкомпонентным спинором.

В § 61 было показано, что произвольное состояние частицы является в то же время состоянием с определенной проекцией спина на некоторое направление в пространстве. Иными словами, для состояния с неопределенной проекцией спина на ось $z$ всегда найдется такая ось $z'$, по отношению к которой указанное состояние будет состоянием с определенной проекцией спина. Мы видим, следовательно, что если пучок состоит из частиц, находящихся в одинаковом состоянии, то он будет полностью поляризован вдоль некоторого направления. Если пучок частично поляризован, то частицы описываются разными спинорами. В этом случае пучок не может быть описан с помощью волновой функции, и мы имеем смесь состояний (см. § 23). Тем не менее для описания спиновых свойств частиц пучка можно ввести некоторую функцию $\varphi$, определяемую равенством [1])

$$\varphi = c_1\varphi_1\varepsilon_1 + c_2\varphi_2\varepsilon_2 + \ldots$$

Суммирование производится по спиновым состояниям частиц пучка. Через $\varphi_k$ мы обозначили спинор, описывающий группу частиц, находящихся в $k$-м спиновом состоянии. Коэффициент $c_k$ определяет вес этого состояния. Он пропорционален числу частиц в данной группе. Величины $\varepsilon_i$ и $\varepsilon_k$, удовлетворяющие условию $\varepsilon_i^2 = 1$ и $\varepsilon_i\varepsilon_k = 0$, введены для того, чтобы в квадратичных выражениях, определяющих средние значения, исключить интерференцию между волновыми функциями частиц, находящихся в различных спиновых состояниях. Определим вектор поляризации

[1]) L. Wolfenstein, Phys. Rev. **75**, 1664 (1943). Имеется русский перевод в сборнике «Проблемы современной физики», № 6, 1955, стр. 53.

как вектор спина, усредненный по пучку:

$$\boldsymbol{P}=\overline{\sigma}=\frac{\varphi^{+}\sigma\varphi}{\varphi^{+}\varphi}=\frac{\sum\limits_{n}|c_n|^2\varphi_n^{+}\sigma\varphi_n}{\sum\limits_{n}|c_n|^2}=\frac{\sum\varphi_n'^{+}\sigma\varphi_n'}{\sum\varphi_n'^{+}\varphi_n'}, \tag{89,1}$$

где $\varphi_n'=c_n\varphi_n$.

Формула (89,1) имеет простой смысл: $(\varphi_n^{+}\sigma\varphi_n)$ представляет среднее значение вектора спина в $n$-м состоянии, а отношение $\frac{|c_n|^2}{\sum\limits_{n}|c_n|^2}$ определяет вероятность реализации $n$-го состояния в пучке. Последняя вероятность равна $\frac{N_n}{N}$, где $N_n$ — число частиц, находящихся в $n$-м состоянии, а $N$ — полное число частиц в пучке.

Запишем $c_n\varphi_n$ в виде

$$c_n\varphi_n=\begin{pmatrix}u_n\\ v_n\end{pmatrix}. \tag{89,2}$$

Подставляя выражение (89,2) в (89,1), легко находим компоненты вектора поляризации:

$$\left.\begin{aligned}P_x&=\frac{2\,\mathrm{Re}\sum\limits_{n}u_n^{*}v_n}{\sum\limits_{n}(|u_n|^2+|v_n|^2)},\\ P_y&=\frac{2\,\mathrm{Im}\sum\limits_{n}u_n^{*}v_n}{\sum\limits_{n}(|u_n|^2+|v_n|^2)},\\ P_z&=\frac{\sum\limits_{n}(|u_n|^2-|v_n|^2)}{\sum\limits_{n}(|u_n|^2+|v_n|^2)}.\end{aligned}\right\} \tag{89,3}$$

Если половина частиц, составляющих пучок, поляризована в каком-нибудь направлении, например, в положительном направлении оси $z$, а другая половина — в обратном направлении, вектор поляризации пучка $\boldsymbol{P}$ будет равен нулю. Действительно, одна группа частиц описывается спиновыми функциями

$$c_1\varphi_1=\begin{pmatrix}c_1\\ 0\end{pmatrix},$$

тогда как другая группа обладает спиновыми функциями

$$c_2\varphi_2=\begin{pmatrix}0\\ c_2\end{pmatrix},\qquad |c_1|^2=|c_2|^2.$$

Подставляя эти значения в (89,3), находим, что вектор поляризации равен нулю.

Перейдем теперь к случаю рассеяния частицы со спином половина на мишени со спином 0. При этом волновая функция $\psi$, описывающая процесс упругого рассеивания, на больших расстояниях имеет вид

$$\psi = \varphi e^{ikz} + \frac{e^{ikr}}{r} f\varphi. \tag{89,4}$$

Здесь $\varphi$ — спинор, характеризующий состояние падающей частицы; $f$ — некоторая двухрядная матрица, зависящая от углов рассеяния. Установим ее общий вид. Прежде всего заметим, что любая двухрядная матрица может быть выражена через единичную матрицу и матрицы Паули $\sigma_x$, $\sigma_y$, $\sigma_z$, так как указанные матрицы составляют полную систему (см. § 60). Соответственно имеем

$$f = g(\theta) I + \boldsymbol{h}(\theta)\boldsymbol{\sigma}. \tag{89,5}$$

Дальнейший вид функций $g$ и $\boldsymbol{h}$ может быть получен из следующих соображений. Закон преобразования первого и второго членов в формуле (89,4) при пространственных вращениях и отражениях должен быть одинаков. Поскольку первый член преобразуется как спинор, второй член в этой формуле также должен иметь характер спинора. Отсюда следует, что функция $g$ должна быть скаляром. Поскольку оператор $\boldsymbol{\sigma}$ преобразуется как псевдовектор, $\boldsymbol{h}$ тоже должен быть псевдовектором. С другой стороны, псевдовектор $\boldsymbol{h}$ зависит от величин, характеризующих процесс рассеяния, и может определяться только двумя векторами, $\boldsymbol{k}_0$ и $\boldsymbol{k}_1$ (волновые векторы частицы до и после рассеяния). Из этих двух векторов можно построить единственный единичный псевдовектор

$$\boldsymbol{n} = \frac{\boldsymbol{k}_0 \times \boldsymbol{k}_1}{|\boldsymbol{k}_0 \times \boldsymbol{k}_1|},$$

поэтому

$$\boldsymbol{h} = h(\theta)\,\boldsymbol{n},$$

где $h(\theta)$ скаляр.

Окончательно получаем

$$f = g(\theta) I + \boldsymbol{n}\boldsymbol{\sigma} h(\theta). \tag{89,6}$$

Сечение упругого рассеяния, соответственно, имеет вид

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \varphi^+ f^+ f\varphi = |g|^2 + |h|^2 + 2\,\mathrm{Re}\,(g^* h)\,\boldsymbol{\mu}\boldsymbol{n}, \tag{89,7}$$

где $\boldsymbol{\mu} = \varphi^+ \boldsymbol{\sigma} \varphi$.

Усредним выражение (89,7) по спиновым состояниям частиц падающего пучка. Тогда, пользуясь (89,1), найдем

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |g|^2 + |h|^2 + 2\,\mathrm{Re}\,(g^*h)\,\boldsymbol{P}_{\text{пад}}\boldsymbol{n} = \\ = (|g|^2 + |h|^2)\left(1 + \frac{2\,\mathrm{Re}\,(g^*h)\,\boldsymbol{P}_{\text{пад}}\boldsymbol{n}}{|g|^2 + |h|^2}\right), \qquad (89,8)$$

где $\boldsymbol{P}_{\text{пад}}$ — вектор поляризации падающего пучка.

Если падающий пучок не поляризован ($P_{\text{пад}} = 0$), то дифференциальное эффективное сечение равно

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |g|^2 + |h|^2. \qquad (89,9)$$

Перейдем теперь к исследованию состояния рассеянного пучка. Подчеркнем, что после рассеяния может возникнуть поляризация пучка даже и в том случае, когда падающий пучок был не поляризован. Из общих соображений легко указать направление поляризации рассеянного пучка. Действительно, поляризация описывается псевдовектором $\boldsymbol{P}$, который может быть ориентирован только в направлении единственного псевдовектора $\boldsymbol{n}$. Следовательно, для рассеянного пучка, который был до рассеяния не поляризован, имеем

$$\boldsymbol{P}_{\text{расс}} = P_{\text{расс}}\boldsymbol{n}. \qquad (89,10)$$

Определим величину поляризации рассеянного пучка. Основываясь на определении (89,1), имеем

$$\boldsymbol{P}_{\text{расс}} = \frac{\sum\limits_n (f\varphi_n)^+\,\sigma\,(f\varphi_n)}{\sum\limits_n (f\varphi_n)^+\,(f\varphi_n)} = \frac{\sum\limits_n \varphi_n^+ f^+ \sigma f \varphi_n}{\sum\limits_n \varphi_n^+ f^+ f \varphi_n}. \qquad (89,11)$$

Поскольку, по предположению, падающий пучок не поляризован, его можно представить в виде двух пучков, состоящих из одинакового числа частиц, но с противоположно направленными спинами. Тогда суммирование по $n$ сводится к суммированию по двум состояниям, характеризующимся противоположно направленными спинами.

Следовательно, имеем

$$\boldsymbol{P}_{\text{расс}} = \frac{\sum\limits_{i=1}^{2} \varphi_i^+ f^+ \sigma f \varphi_i}{\sum\limits_{i=1}^{2} \varphi_i^+ f^+ f \varphi_i}.$$

Мы видим, что для вычисления поляризации нужно найти суммы диагональных элементов (шпуры) матриц некоторых опе-

раторов. В обозначениях § 45 последнюю формулу можно переписать в виде

$$\boldsymbol{P}_{\text{расс}} = \frac{\operatorname{Sp} f^{+}\sigma f}{\operatorname{Sp} f^{+} f}. \tag{89,12}$$

Вычислим прежде $\operatorname{Sp} f^{+}\sigma f$. Используя для этого выражение (89,6), имеем

$$\operatorname{Sp} f^{+}\sigma f = \operatorname{Sp}\{[g^{*}I + h^{*}(\boldsymbol{n}\sigma)]\,\sigma\,[gI + h(\boldsymbol{n}\sigma)]\}.$$

Легко заметить из формул (60,15), (60,16), что $\operatorname{Sp}\sigma_i = 0$ ($i = 1, 2, 3$). Из соотношений типа $\sigma_x\sigma_y = i\sigma_z$ следует, что

$$\operatorname{Sp}\sigma_i\sigma_k = 0 \qquad (i \neq k).$$

Так как $\sigma_i^2 = I$, то $\operatorname{Sp}\sigma_i^2 = 2$ ($i = 1, 2, 3$). Пользуясь этими соотношениями, получаем

$$\operatorname{Sp} f^{+}\sigma f = \operatorname{Sp}[g^{*}h\sigma(\boldsymbol{n}\sigma) + h^{*}g(\boldsymbol{n}\sigma)\sigma] =$$
$$= \operatorname{Sp}(g^{*}h + h^{*}g)(\sigma_x^2 n_x \boldsymbol{i} + \sigma_y^2 n_y \boldsymbol{j} + \sigma_z^2 n_z \boldsymbol{k}) = 4\boldsymbol{n}\operatorname{Re}(g^{*}h).$$

С помощью аналогичных вычислений найдем

$$\operatorname{Sp} f^{+} f = 2(|h|^2 + |g|^2).$$

Таким образом, вектор поляризации рассеянного пучка имеет вид

$$\boldsymbol{P}_{\text{расс}} = \frac{2\operatorname{Re}(g^{*}h)}{|g|^2 + |h|^2}\boldsymbol{n}; \qquad \boldsymbol{n} = \frac{\boldsymbol{k}\times\boldsymbol{k}_1}{|\boldsymbol{k}\times\boldsymbol{k}_1|}. \tag{89,13}$$

Используя (89,13) и (89,8), выразим эффективное сечение рассеяния через вектор поляризации

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = (|g|^2 + |h|^2)(1 + \boldsymbol{P}_{\text{пад}}\boldsymbol{P}_{\text{расс}}), \tag{89,14}$$

где $\boldsymbol{P}_{\text{расс}}$ — вектор поляризации пучка рассеянных частиц в том случае, когда пучок до рассеяния был не поляризован.

Мы видим, таким образом, что эффективное сечение рассеяния зависит от поляризации падающего и рассеянного пучков. Экспериментально такие зависимости можно наблюдать в опытах по двойному рассеянию. Неполяризованный пучок частиц (рис. 25) после рассеяния поляризуется. Затем поляризованный пучок частиц падает на второй рассеиватель. При этом эффективное сечение для рассеяния налево (вектор $\boldsymbol{k}_2$) и направо (вектор $\boldsymbol{k}_2'$) оказываются различными.

Для простоты предположим, что все векторы $\boldsymbol{k}$, $\boldsymbol{k}_1$, $\boldsymbol{k}_2$ и $\boldsymbol{k}_2'$ лежат в одной плоскости. Вектор $\boldsymbol{n}$, характеризующий поляризацию после первого рассеяния, направлен вверх перпендикулярно к плоскости чертежа. Векторы $\boldsymbol{P}_{\text{расс}}$, входящие в формулу (89,14), имеют противоположные направления для пучков,

рассеянных вторично налево и направо, из-за разных направлений векторов $\boldsymbol{k}_2$ и $\boldsymbol{k}_2'$. Таким образом, эффективное сечение для пучка, рассеянного налево, равно

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = (|g|^2 + |h|^2)[1 + P_{\text{расс}}(\theta_1) P_{\text{расс}}(\theta_2)]. \qquad (89,15)$$

Соответственно для пучка, рассеянного направо, имеем

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = (|g|^2 + |h|^2)[1 - P_{\text{расс}}(\theta_1) P_{\text{расс}}(\theta_2)]. \qquad (89,16)$$

Мы видим, что отношение числа частиц, рассеянных налево и направо, определяется поляризацией $P_{\text{расс}}$. Имеем

$$R = \frac{1 + P_{\text{расс}}(\theta_1) P_{\text{расс}}(\theta_2)}{1 - P_{\text{расс}}(\theta_1) P_{\text{расс}}(\theta_2)}. \qquad (89,17)$$

В качестве примера рассмотрим рассеяние нейтрона на ядре с учетом спин-орбитального взаимодействия между ними. Представление об этом взаимодействии впервые ввел Ферми для объяснения явления поляризации быстрых нейтронов. Оно имеет вид

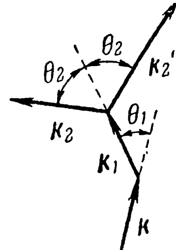


Рис. 25.

$$\hat{H}' = V(r) + W(r)\sigma\hat{\boldsymbol{l}}. \qquad (89,18)$$

Здесь $V(r)$ и $W(r)$ — функции, зависящие только от радиуса. $\hat{\boldsymbol{l}}$ — оператор орбитального момента нейтрона.

Из эксперимента следует, что при ядерных взаимодействиях четность сохраняется. Оператор (89,18) построен так, чтобы он автоматически удовлетворял этому закону сохранения. Для дальнейшего удобно записать функцию $W(r)$ в виде

$$W(r) = \frac{1}{r}\frac{d}{dr}Y(r).$$

Найдем функции $g$ и $h$, используя борновское приближение. Как было показано в § 84, амплитуда $f$ в этом приближении равна

$$f = -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int e^{-i\boldsymbol{k}_1\boldsymbol{r}}\hat{H}'(\boldsymbol{r})\, e^{i\boldsymbol{k}_0\boldsymbol{r}}\, dV =$$
$$= -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\left\{V_{\boldsymbol{k}_0-\boldsymbol{k}_1} + \frac{\hbar}{i}\sigma\int e^{-i\boldsymbol{k}_1\boldsymbol{r}}\frac{dY}{r\,dr}[\boldsymbol{r}\times\nabla]\, e^{i\boldsymbol{k}_0\boldsymbol{r}}\, dV\right\},$$

где $V_{\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}'}$ — компонента Фурье функции $V$. С помощью элементарных преобразований находим

$$f = -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\left\{V_{\boldsymbol{k}_0-\boldsymbol{k}_1} - \hbar\sigma\left[\boldsymbol{k}_0\times\int e^{i(\boldsymbol{k}_0-\boldsymbol{k}_1)\boldsymbol{r}}\nabla Y\, dV\right]\right\}.$$

Интегрируя по частям, получим

$$f=-\frac{m}{2\pi\hbar^2}\left\{V_{\boldsymbol{k}_0-\boldsymbol{k}_1}+\hbar\sigma\left[\boldsymbol{k}_0\times\int Y\,\nabla e^{i(\boldsymbol{k}_0-\boldsymbol{k}_1)\boldsymbol{r}}\,dV\right]\right\}=$$
$$=-\frac{m}{2\pi\hbar^2}\left\{V_{\boldsymbol{k}_0-\boldsymbol{k}_1}-i\hbar\sigma\,[\boldsymbol{k}_0\times\boldsymbol{k}_1]\,Y_{\boldsymbol{k}_0-\boldsymbol{k}_1}\right\}. \qquad (89,19)$$

Сравнивая (89,19) и (89,6), находим функции $h$ и $g$. Они имеют вид

$$g=-\frac{m}{2\pi\hbar^2}V_{k_0-k_1},\qquad h=\frac{imk^2\sin\theta}{2\pi\hbar}Y_{k_0-k_1}. \qquad (89,20)$$

Отметим, что в рассматриваемом первом приближении теории возмущений отсутствует поляризация рассеянных частиц. Действительно, подставляя соотношение (89,20) в формулу (89,13), получаем $\boldsymbol{P}_{\text{расс}}=0$. Однако при более точном вычислении $\boldsymbol{P}_{\text{расс}}\neq 0$.

Более общий формализм, пригодный для рассмотрения рассеяния частиц на поляризованных мишенях, читатель найдет, например, в книге Давыдова [1]).

## § 90. Переход к классическому пределу в квантовых формулах рассеяния

Преобразуем предварительно точную формулу для амплитуды рассеяния к виду, удобному для перехода к классическому пределу.

Если мы используем разложение $\delta$-функции по полиномам Лежандра (III, 11), то амплитуда рассеяния (86,11) может быть записана в виде

$$f(\theta)=\frac{1}{2ik}\sum_{l=0}(2l+1)\,P_l(\cos\theta)\,e^{2i\delta_l}-\frac{1}{ik}\delta(1-\cos\theta). \qquad (90,1)$$

Для всех углов $\theta\neq 0$ формула (90,1) принимает вид

$$f(\theta)=\frac{1}{2ik}\sum_{l}(2l+1)\,P_l(\cos\theta)\,e^{2i\delta_l}. \qquad (90,2)$$

В квазиклассическом приближении радиальная часть волновой функции имеет вид (43,2)

$$R_l=\frac{A_l}{r\sqrt{p_r}}\sin\left\{\frac{1}{\hbar}\int_a^r\sqrt{2m[E-U(r)]-\frac{\hbar^2\left(l+\frac{1}{2}\right)^2}{r^2}}\,dr+\frac{\pi}{4}\right\}.$$

---

[1]) А. С. Давыдов, Теория атомного ядра, Физматгиз, 1958, стр. 350.

Выражение для $R_l$ нужно понимать как асимптотическое выражение, т. е. считать в нем $r \to \infty$. Через $a$ обозначена координата точки поворота, в которой полная энергия $E$ равна сумме потенциальной и центробежной энергии, т. е.

$$E = U(a) + \frac{\hbar^2 \left(l + \frac{1}{2}\right)^2}{2ma^2}.$$

В § 40 в условие для определения точки поворота не была включена центробежная энергия, поскольку движение считалось одномерным.

Сравнивая выражение для $R_l$ с формулой (86,2), мы видим, что фаза рассеяния может быть представлена в виде

$$\delta_l = \frac{1}{\hbar} \int_a^r \left( \sqrt{2m[E - U(r)] - \frac{\hbar^2 \left(l + \frac{1}{2}\right)^2}{r^2}} - k \right) dr + \\ + \frac{\pi}{2}\left(l + \frac{1}{2}\right) - ka. \qquad (90,3)$$

В (90,3) нужно считать $r \to \infty$, $l \gg 1$. При этом значения фаз $\delta_l$ очень велики по абсолютной величине. Формула для амплитуды рассеяния (90,2) может быть упрощена, если учесть, что в квазиклассическом приближении следует считать $l \gg 1$. Тогда для полиномов Лежандра $P_l(\cos\theta)$ можно написать асимптотическое выражение при $l \gg 1$. Оно имеет вид [1])

$$P_l(\cos\theta) = \frac{1}{i\sqrt{2\pi l \sin\theta}} \left[ e^{i\left(l+\frac{1}{2}\right)\theta + i\frac{\pi}{4}} - e^{-i\left(l+\frac{1}{2}\right)\theta - i\frac{\pi}{4}} \right].$$

Тогда для амплитуды рассеяния получаем

$$f \equiv \frac{1}{ik} \sum_{l \gg 1} l P_l(\cos\theta) e^{2i\delta_l} = \frac{1}{k} \sum B(l) \left(e^{i\alpha(l)} - e^{i\beta(l)}\right), \qquad (90,4)$$

где

$$B(l) = -\sqrt{\frac{l}{2\pi \sin\theta}},$$

$$\alpha(l) = 2\delta_l + \left(l + \frac{1}{2}\right)\theta + \frac{\pi}{4},$$

$$\beta(l) = 2\delta_l - \left(l + \frac{1}{2}\right)\theta - \frac{\pi}{4}.$$

Для получения $f(\theta)$ следует просуммировать ряды

$$\sum_l B(l)\, e^{i\alpha(l)} \quad \text{и} \quad \sum_l B(l)\, e^{i\beta(l)}.$$

---

[1]) Н. Н. Лебедев, Специальные функции и их приложения, Физматгиз, 1953, стр. 256.

Мы рассмотрим один из этих рядов, поскольку, как это будет ясно из дальнейшего, в заданном поле сил (отталкивания или притяжения) только один из рядов имеет сумму, отличную от нуля. Величины $\alpha(l)$, как видно из их определения, при больших $l$ велики. Поэтому члены ряда $\sum B(l)e^{i\alpha(l)}$, содержащие быстро осциллирующие множители, взаимно погашаются. Исключение возможно в том случае, если при некотором значении $l = l_0$ величина $\alpha(l_0)$ имеет экстремум, т. е.

$$\left.\frac{d\alpha(l)}{dl}\right|_{l=l_0} = 0. \tag{90,5}$$

Вблизи экстремума функция $\alpha(l)$ изменяется медленно и сумма ряда сводится к сумме членов со значениями $l$, близкими к $l_0$.

В этом случае для выполнения суммирования можно заменить сумму на интеграл. В последнем подынтегральное выражение существенно отлично от нуля только при $l \approx l_0$, и интеграл можно вычислить по методу перевала (см. § 20 ч. III).

Итак, можно написать:

$$\sum_l B(l)e^{i\alpha(l)} = B(l_0)e^{i\alpha(l_0)}\int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\gamma(l-l_0)^2}\,dl = e^{i\alpha(l_0)}B(l_0)\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-c(l-l_0)^2}\,dl,$$

где

$$\gamma = \frac{1}{2}\left.\frac{d^2\alpha}{dl^2}\right|_{l=l_0}, \qquad c = -i\gamma. \tag{90,6}$$

Вычисление интеграла (90,6) производится непосредственно, и мы получаем

$$\sum_l B(l)\,e^{i\alpha_l} = B(l_0)\,e^{i\alpha(l_0)}\left(\frac{i\pi}{\gamma}\right)^{1/2}. \tag{90,7}$$

С помощью последнего соотношения амплитуда рассеяния может быть написана в виде

$$f(\theta) = \frac{B(l_0)}{k}\,e^{i\alpha(l_0)}\left(\frac{i\pi}{\gamma}\right)^{1/2}. \tag{90,8}$$

Величину $\alpha(l_0)$ мы найдем в дальнейшем, а пока рассмотрим физический смысл уравнения (90,5). Для этого определим производную $\left.\frac{d\alpha}{dl}\right|_{l=l_0}$. С помощью соотношений (90,4) имеем

$$\left.\frac{d\alpha}{dl}\right|_{l=l_0} = 2\left.\frac{d\delta_l}{dl}\right|_{l=l_0} + \theta = 0. \tag{90,9}$$

При дифференцировании следует помнить, что угол $\theta$ задан, и мы определяем эффективное сечение для определенной величины угла. Если провести дифференцирование по $l$ и

использовать формулу (90,3), то мы получим:

$$\left(\frac{d\delta_l}{dl}\right)_{l=l_0} = -\int_a^\infty \frac{\hbar\left(l_0+\frac{1}{2}\right)dr}{r^2\sqrt{2m(E-U)-\frac{\hbar^2\left(l_0+\frac{1}{2}\right)^2}{r^2}}} -$$

$$-\sqrt{2m(E-U)-\frac{\hbar^2\left(l+\frac{1}{2}\right)^2}{r^2}}\Bigg|_{r=a}\left(\frac{da}{dl}\right)_{l=l_0} + k\frac{da}{dl} - k\frac{da}{dl} + \frac{\pi}{2} =$$

$$= -\int_a^\infty \frac{\hbar\left(l_0+\frac{1}{2}\right)dr}{r^2\sqrt{2m(E-U)-\frac{\hbar^2\left(l_0+\frac{1}{2}\right)^2}{r^2}}} + \frac{\pi}{2},$$

поскольку в точке поворота $r = a$ подкоренное выражение обращается в нуль. Условие (90,9) приобретает вид

$$-\int_a^\infty \frac{\hbar\left(l_0+\frac{1}{2}\right)dr}{r^2\sqrt{2m(E-U)-\frac{\hbar^2\left(l_0+\frac{1}{2}\right)^2}{r^2}}} + \frac{\pi}{2} \pm \frac{\theta}{2} = 0. \qquad (90,10)$$

Если бы мы проводили соответствующие вычисления для второй суммы, то экстремуму $\beta(l)$ отвечал бы нижний знак в (90,10). Для краткости оба условия совмещены. Формула (90,10) определяет значение $l_0$.

Величина $\hbar\left(l_0+\frac{1}{2}\right) = L$ представляет собой момент количества движения. После введения момента $L$ формулу (90,10) можно преобразовать к виду

$$\int_a^\infty \frac{L\,dr}{r^2\sqrt{2m(E-U)-\frac{L^2}{r^2}}} = \frac{\pi \pm \theta}{2}. \qquad (90,11)$$

В классической механике момент количества движения может быть связан с параметром соударения $\rho$ с помощью следующего соотношения:

$$L = m\rho v,$$

где $v$ — скорость частицы на бесконечности. Подставляя это значение для момента количества движения в формулу (90,11), мы получаем выражение, в точности совпадающее с классическим соотношением, связывающим параметр соударения с

углом рассеяния $\theta$[1]),

$$\int\limits_{r=a}^{\infty} \frac{mv\rho\, dr}{r^2 \sqrt{2m(E-U) - \left(\frac{mv\rho}{r}\right)^2}} = \frac{\pi \pm \theta}{2}. \tag{90,12}$$

Значение прицельного параметра $\rho$ определяется положительным корнем уравнения (90,12). Из механики известно, что в поле сил отталкивания положительный корень этого уравнения существует только при отрицательном знаке при $\theta$. Наоборот, в поле сил притяжения этот корень имеется при положительном знаке при $\theta$.

Рассмотрим случай сил отталкивания. Тогда условие (90,9) может выполняться только для $\alpha(l)$, но не для $\beta(l)$. Соответственно, лишь первый из рядов в (90,4) имеет сумму, отличную от нуля.

Перейдем теперь к вычислению сечения. Согласно формулам (83,5) и (90,8) оно определяется выражением

$$d\sigma = |f(\theta)|^2 d\Omega = \frac{1}{k^2} |B(l_0)|^2 \frac{\pi}{|\gamma|} d\Omega.$$

Величина $\gamma$ определяется выражением (90,6). С помощью (90,4) и (90,3) получим

$$\gamma = \hbar \frac{\partial^2}{\partial L^2} \int\limits_a^{\infty} \left[2m(E-U) - \frac{L^2}{r^2}\right]^{1/2} dr = -\frac{\partial}{\partial L} \int\limits_a \frac{L \frac{\hbar}{r^2} dr}{\sqrt{2m(E-U) - \frac{L^2}{r^2}}}. \tag{90,13}$$

Используя (90,11), преобразуем выражение для $\gamma$ к виду

$$\gamma = \pm \frac{\hbar}{2} \frac{\partial \theta}{\partial L}.$$

Если подставить значение $B$ из (90,4) и использовать найденное значение для $\gamma$, то дифференциальное эффективное сечение приобретает вид

$$d\sigma = |f(\theta)|^2 d\Omega = \frac{L}{m^2 v^2 \sin\theta} \left| \frac{\partial L}{\partial \theta} \right| d\Omega. \tag{90,14}$$

Заменяя в (90,14) величину $L$ на ее классическое значение, получим

$$d\sigma = \frac{\rho}{\sin\theta} \left| \frac{\partial \rho}{\partial \theta} \right| d\Omega. \tag{90,15}$$

[1]) См., например, Л. Д. Ландау и Е. М. Лифшиц, Механика, Физматгиз, 1958, стр. 64.

Выражение (90,15) представляет собой обычную формулу рассеяния, даваемую классической механикой.

Перейдем теперь к выяснению границ применимости формулы для сечения рассеяния (90,15). Они могут быть установлены из следующих наглядных соображений.

О движении частицы по траектории можно говорить тогда, когда соответствующая ей длина волны мала по сравнению с размерами системы. В данном случае длина волны должна быть мала по сравнению с размерами той области, в которой происходит заметное взаимодействие. Если размер этой области обозначить через $R$, то указанное требование можно записать в виде

$$\lambda \ll R, \tag{90,16}$$

где $\lambda$ — длина волны де Бройля.

Подставляя значение $\lambda$ в формулу (90,16), мы находим

$$R \gg \frac{2\pi\hbar}{mv}. \tag{90,17}$$

Для того чтобы поведение частицы можно было характеризовать классическими понятиями, надо, чтобы квантовомеханические неопределенности были малы. Иными словами, надо, чтобы выполнялись соотношения

$$\frac{\Delta\theta}{\theta} \ll 1, \qquad \frac{\Delta\rho}{\rho} \ll 1, \tag{90,18}$$

где $\rho$ — классический параметр столкновения, а $\Delta\theta$ и $\Delta\rho$ — соответственно квантовомеханические неопределенности для угла рассеяния $\theta$ и параметра столкновения $\rho$.

Для величины $\Delta\theta$ можно написать выражение, справедливое по порядку величины

$$\Delta\theta \sim \frac{\Delta p}{p}, \tag{90,19}$$

где $\Delta p$ — неопределенность поперечной составляющей импульса. Используя соотношение неопределенности для координаты и импульса

$$\Delta p \cdot \Delta\rho \sim \hbar$$

и исключая из (90,19) величину $\Delta p$, а затем используя (90,18), получаем

$$\theta \gg \Delta\theta \sim \frac{\hbar}{\Delta\rho p} \gg \frac{\hbar}{\rho p}. \tag{90,20}$$

Последнее условие принимает значительно более простой вид, если углы рассеяния малы. В этом случае угол рассеяния $\theta$ может быть найден простым способом. Именно он равен отношению величины поперечного импульса, приобретенного

рассеянной частицей при прохождении через поле рассеивателя к продольному импульсу. Поперечный импульс равен силе, действующей на частицу $U'(\rho)$, помноженной на эффективное время $\tau$, в течение которого эта сила действует:

$$\tau = \frac{\rho}{v}.$$

Таким образом, угол рассеяния $\theta$ по порядку величины равен

$$\theta \approx |U'(\rho)| \frac{\rho}{vp}. \qquad (90,21)$$

Или подставляя (90,21) в (90,20), находим условие применимости теории

$$|U'(\rho)|\,\rho^2 \gg \hbar v.$$

Если же производную $U'(\rho)$ заменить через $U(\rho)/\rho$, то условие применимости перепишется в виде

$$|U(\rho)| \gg \frac{\hbar v}{\rho}. \qquad (90,22)$$

Сравнивая (90,22) с условием применимости формулы Борна (85,12), мы видим, что условия противоположны друг другу. Таким образом, борновское и квазиклассическое приближения в значительной степени дополняют друг друга.

## § 91. Общая теория неупругого рассеяния и поглощения частиц

До сих пор мы ограничивались рассмотрением процесса упругого рассеяния. Перейдем теперь к более общему случаю, когда возможно и неупругое рассеяние.

Неупругими называются всякие процессы, при которых изменяется внутреннее состояние частиц. Так, например, неупругими будут столкновения, сопровождающиеся возбуждением (например, возбуждением атома или ядра), распадом или образованием новых частиц и т. д. Каждый из возможных процессов именуется соответствующим каналом реакции. Если процесс совместим с законами сохранения, канал называют открытым. В дальнейшем мы будем рассматривать процессы, для которых открыты неупругий и упругий каналы реакции. Мы начнем с некоторого обобщения фазовой теории рассеяния. Это позволит нам охватить одновременно процессы упругого и неупругого рассеяния и поглощения. Для формального описания любого процесса рассеяния окружим мысленно рассеивающий центр сферой достаточно большого радиуса $R_0$.

Рассмотрим характер $l$-й парциальной волны при $r > R_0$ в трех случаях:

1) в начале координат нет рассеивающего центра;

2) в начале координат помещается рассеивающий центр, причем частица испытывает только упругое рассеяние;

3) в начале координат находится рассеивающий центр, на котором частица претерпевает неупругое рассеяние.

В первом случае радиальная функция $l$-й парциальной волны может быть написана [см. (36,10)] в виде суперпозиции двух волн

$$R_l = a_l \frac{e^{i\left(kr - \frac{\pi l}{2}\right)}}{2ikr} - a_l \frac{e^{-i\left(kr - \frac{\pi l}{2}\right)}}{2ikr} = a_l \frac{\sin\left(kr - \frac{\pi l}{2}\right)}{kr}.$$

Второе слагаемое представляет сходящуюся волну, первое — расходящуюся. При этом мы пользуемся асимптотическими выражениями, поскольку, по предположению, $R_0$ достаточно велико. Амплитуды и фазы обеих волн одинаковы и волновая функция $R_l$ является произведением вещественной функции на постоянный множитель. Поэтому поток через замкнутую поверхность равен нулю:

$$j_l = \frac{\hbar}{2mi} \int \left(\psi_l^* \frac{\partial \psi_l}{\partial r} - \psi_l \frac{\partial \psi_l^*}{\partial r}\right) r^2 \, d\Omega = 0,$$

где $\psi_l = P_l(\cos\theta) R_l(r)$.

Во втором случае радиальная функция $l$-й парциальной волны, согласно (86,2), запишется в виде

$$R_l = B_l \frac{\sin\left(kr + \delta_l - \frac{\pi l}{2}\right)}{kr} = F_l \frac{e^{2i\delta_l} e^{i\left(kr - \frac{\pi l}{2}\right)} - e^{-i\left(kr - \frac{\pi l}{2}\right)}}{2ikr}. \quad (91,1)$$

Амплитуды сходящейся и расходящейся волн отличаются друг от друга фазовым множителем $e^{2i\delta_l}$, причем $\left|e^{2i\delta_l}\right| = 1$. В этом случае полный парциальный поток через поверхность сферы также равен нулю (парциальная волновая функция, зависящая от $l$, вещественна). Отсюда следует, что расходящийся и сходящийся потоки $l$-й парциальной волны равны между собой. Тот факт, что сходящаяся и расходящаяся волны имеют разные коэффициенты, $e^{2i\delta_l}$ и единицу, не противоречит этому равенству, так как $\left|e^{2i\delta_l}\right| = 1$.

В третьем случае, когда частицы испытывают неупругое рассеяние, написать общее выражение для радиальной функции с учетом всех возможных неупругих процессов не представляется возможным. Мы можем, однако, упростить задачу, если рассматривать отдельно упругое рассеяние и всевозможные виды неупругого рассеяния.

Для радиальной функции $l$-й парциальной волны, описывающей упругое рассеяние частицы, в этом случае можно написать следующее формальное выражение:

$$R_l = b_l \frac{S_l e^{i\left(kr - \frac{\pi l}{2}\right)} - e^{-i\left(kr - \frac{\pi l}{2}\right)}}{2ikr}. \qquad (91,2)$$

Это выражение построено по тому же принципу, что и (91,1), однако оно учитывает специфику процесса, при котором совместно с упругим рассеянием могут существовать неупругие процессы или поглощение. Введенный коэффициент $S_l$ по модулю меньше единицы. Это выражает тот факт, что при наличии поглощения или неупругого рассеяния сходящийся поток упругорассеянных частиц больше расходящегося. При этом волновая функция запишется в виде

$$\psi = \sum_l b_l \frac{S_l e^{i\left(kr - \frac{\pi l}{2}\right)} - e^{-i\left(kr - \frac{\pi l}{2}\right)}}{2ikr} P_l(\cos\theta) = \sum_l \psi_l.$$

Коэффициенты $b_l$ опять определяются из требования, чтобы волновая функция $\psi$ совпадала с (83,3). Проделывая вычисления, аналогичные тем, которые были приведены при расчете упругого рассеяния, найдем волновую функцию в виде

$$\psi = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{i^l}{2ikr}(2l+1)\left[S_l e^{i\left(kr - \frac{\pi l}{2}\right)} - e^{-i\left(kr - \frac{\pi l}{2}\right)}\right] P_l(\cos\theta). \quad (91,2')$$

Нетрудно показать, что поток упруго-рассеянных частиц с заданным моментом через сферу радиуса $r \gg R_0$ отличен от нуля. Действительно, имеем

$$\frac{\partial \psi_l}{\partial r} = \frac{i^l (2l+1) P_l(\cos\theta)}{2ikr}\left[ikS_l e^{i\left(kr - \frac{\pi l}{2}\right)} + ike^{-i\left(kr - \frac{\pi l}{2}\right)}\right].$$

При этом в выражении для $\frac{\partial \psi_l}{\partial r}$ удержаны только члены, пропорциональные $1/r$. Члены, пропорциональные $1/r^2$, опущены, поскольку мы хотим найти поток через сферу большого радиуса. Вычислим далее полный поток частиц через сферу радиуса $r \gg R_0$. Он равен

$$j_l = \frac{i\hbar}{2m} r^2 \int \left(\psi_l^* \frac{\partial \psi_l}{\partial r} - \psi_l \frac{\partial \psi_l^*}{\partial r}\right) d\Omega.$$

Подставляя в выражение для потока функцию $\psi_l$ и $\frac{\partial \psi_l}{\partial r}$ и учитывая условия нормировки полиномов Лежандра $P_l(\cos\theta)$,

получаем

$$j_l = -\frac{\pi\hbar}{mk}(2l+1)(1-|S_l|^2). \qquad (91,3)$$

Так как $|S_l| < 1$, то поток отрицателен. Это означает, что полный поток направлен внутрь сферы.

Легко понять смысл полученного результата: поток падающих на центр частиц с моментом $l$ оказывается бо́льшим, чем поток упруго-рассеянных. Частицы испытывают неупругое рассеяние или поглощение, и интенсивность пучка упруго-рассеянных частиц снижается. Ясно, что, разделив поток $j_l$ на плотность потока падающих частиц, мы найдем в соответствии с определением парциальное эффективное сечение неупругого рассеяния. При этом под неупругим рассеянием понимается совокупность всех процессов, снижающих интенсивность упругого рассеяния. Так как плотность потока падающих частиц равна $v$, то для $l$-го парциального эффективного сечения неупругого рассеяния получаем

$$\sigma_{l\,\text{неуп}} = \frac{\pi}{k^2}(2l+1)(1-|S_l|^2). \qquad (91,4)$$

Что же касается амплитуды упругого рассеяния, то для нее можно, не повторяя выкладок § 86, написать выражение

$$f(\theta) = \frac{1}{2ik}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)(S_l-1)P_l(\cos\theta), \qquad (91,5)$$

так как формула (91,1) отличается от (91,2) заменой $e^{2i\delta_l}$ на $S_l$.

Совокупность комплексных величин $S_l$ определяет эффективное сечение как неупругого, так и упругого рассеяния. В частности, если $S_l = e^{2i\delta_l}$, где $\delta_l$ вещественно, то эффективное сечение неупругого рассеяния обращается в нуль, а амплитуда упругого рассеяния совпадает с его выражением (86,11).

Наряду с $l$-м парциальным эффективным сечением процессов упругого и неупругого рассеяния можно написать и полные эффективные сечения процессов.

Полное эффективное сечение процесса неупругого рассеяния равно, очевидно,

$$\sigma_{\text{неупр}} = \frac{\pi}{k^2}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)(1-|S_l|^2) = \sum_l \sigma_l, \qquad (91,6)$$

а полное эффективное сечение для упругого процесса равно

$$\sigma_{\text{упр}} = \int |f(\theta)|^2 d\Omega = \frac{\pi}{k^2}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)|1-S_l|^2. \qquad (91,7)$$

Перейдем теперь к рассмотрению формулы (91,6).

Каждое эффективное сечение $\sigma_l$ можно наглядно представить себе как характеристику процесса неупругого рассеяния или поглощения частиц с моментом $l$. Так как величина $|S_l|^2 < 1$, то можно утверждать, что парциальное эффективное сечение $\sigma_l$ имеет верхний предел $\sigma_{l\,\max} = \frac{\pi}{k^2}(2l+1)$.

Структура формулы (91,6) и физический смысл коэффициента $1-|S_l|^2$ могут быть легко поняты с помощью следующих рассуждений, основанных на квазиклассическом приближении.

Параметр соударения частицы может быть [см. (86,14)] записан в виде

$$\rho_l = \frac{\hbar}{p}\sqrt{l(l+1)}. \tag{91,8}$$

При больших $l$ для параметра столкновений получаем

$$\rho_l = \frac{\hbar}{p} l.$$

Поверхность кольца, лежащего между двумя окружностями радиуса $\rho_l$ и $\rho_{l+1}$, равна

$$2\pi\rho_l \frac{\hbar}{p} \approx \frac{\pi\hbar^2}{p^2}(2l+1).$$

Число частиц, которые проходят через это кольцо, ориентированное перпендикулярно к падающему потоку, может быть легко найдено. Если плотность потока падающих частиц равна единице, то число частиц, пересекающих кольцо, равно численно $\frac{\pi\hbar^2}{p^2}(2l+1)$.

Введем так называемый коэффициент прилипания $\xi_l$, который, по определению, представляет собой отношение числа поглощенных частиц, упавших на заданную поверхность, к полному числу падающих частиц на ту же поверхность. Число частиц, поглощенных поверхностью кольца, ограниченного радиусами $\rho_l$ и $\rho_{l+1}$, определится выражением

$$\frac{\pi\hbar^2}{p^2}(2l+1)\,\xi_l,$$

и соответственно эффективное сечение поглощения будет иметь вид

$$\sigma_{l\,\text{неупр}} = \frac{\pi}{k^2}(2l+1)\,\xi_l. \tag{91,9}$$

Сравнивая формулу (91,6) и (91,9), видим, что

$$1 - |S_l|^2 = \xi_l, \tag{91,10}$$

т. е. величина $1-|S_l|^2$ имеет смысл коэффициента прилипания.

Наконец, получим еще формулу, связывающую эффективное сечение упругого и неупругого рассеяния. Оказывается, что имеет

место равенство

$$\frac{4\pi}{k}\operatorname{Im} f(0) = \sigma_{\text{неупр}} + \sigma_{\text{упр}}. \qquad (91,11)$$

Для получения этого соотношения вычислим сумму упругого и неупругого эффективных сечений. С помощью соотношений (91,6) и (91,7) имеем

$$\sigma_{\text{неупр}} + \sigma_{\text{упр}} = \frac{\pi}{k^2}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\left(2 - S_l - S_l^*\right) =$$

$$= \frac{\pi}{k^2}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)(2 - 2\operatorname{Re} S_l). \qquad (91,12)$$

С другой стороны, так как полиномы Лежандра при $\theta = 0$ равны единице, то имеем для амплитуды рассеяния

$$f(0) = \frac{1}{2ik}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)(S_l - 1),$$

а мнимая часть амплитуды рассеяния равна

$$\operatorname{Im} f(0) = \frac{1}{2k}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)(1 - \operatorname{Re} S_l).$$

Сравнивая полученные выражения, мы убеждаемся в справедливости равенства (91,11). Мы показали, таким образом, что сумма эффективных сечений неупругого и упругого рассеяния пропорциональна мнимой части амплитуды рассеяния, взятой при значении угла $\theta = 0$. Формула (91,11) носит название оптической теоремы.

В заключение заметим, что поглощение частиц можно описать, введя комплексный потенциал $U = V_1 - iV_2$, где $V_1$ и $V_2$ — действительные функции. Мнимая часть потенциала характеризует поглощение или испускание частиц. Действительно, в этом случае уравнение Шредингера имеет вид

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V_1 - iV_2\right)\psi. \qquad (91,13)$$

Произведя вычисления, аналогичные тем, которые проведены в § 7, мы получим

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + \operatorname{div}\boldsymbol{j} - \frac{2V_2\psi^*\psi}{\hbar} = 0, \qquad (91,14)$$

где

$$\rho = \psi^*\psi, \quad \boldsymbol{j} = \frac{\hbar}{2mi}\left[\psi\operatorname{grad}\psi^* - \psi^*\operatorname{grad}\psi\right].$$

В стационарном случае при $V_2$, равном нулю, $\operatorname{div} \boldsymbol{j} = 0$, что соответствует отсутствию поглощения или испускания частиц. Если $V_2 \neq 0$, то мы получаем

$$\operatorname{div} \boldsymbol{j} = \frac{2V_2\rho}{\hbar}.$$

В зависимости от знака $V_2$ последняя формула описывает испускание или поглощение частиц.

## § 92. Дифракционное рассеяние быстрых нейтронов ядрами

Изучение взаимодействия быстрых нейтронов с ядрами показывает, что в области энергий нейтронов, лежащей выше нескольких десятков *Мэв* для легких ядер и нескольких сотен *Мэв* для тяжелых, происходит весьма энергичный захват нейтронов.

Энергичное поглощение нейтронов сопровождается также их упругим рассеянием. При описании сильного поглощения быстрых нейтронов весьма полезной оказалась следующая оптическая аналогия: ядро по отношению к нейтронам ведет себя как идеально поглощающая (черная) сфера, на которую падает световая волна. Поглощение световой волны черной сферой сопровождается ее возмущением в области пространства, расположенной вблизи поглотителя. Это означает, что наряду с поглощением происходит рассеяние света. Аналогично этому поглощение нейтронов ядром будет возмущать их волновую функцию и нейтроны будут испытывать упругое рассеяние.

Для расчета эффективного сечения упругого рассеяния нейтронов воспользуемся аналогией с оптическими явлениями. В § 36 ч. IV мы видели, что при длине световой волны, меньшей радиуса рассеивающей сферы, позникают дифракционные явления. При этом интенсивность света, рассеянного черным шариком радиуса $R$ в телесный угол $d\Omega$, дается выражением (36,13) ч. IV

$$dI = \frac{I}{\pi} \left| \frac{J_1(kR\theta)}{\theta} \right|^2 d\Omega, \tag{92,1}$$

где $\theta$ — угол рассеяния света, $I$ — полная интенсивность падающего на экран света, $J_1$ — функция Бесселя первого порядка.

Простая оценка показывает, что длина волны нейтронов с энергией порядка 1 *Мэв* в несколько сотен раз меньше размеров ядра. Поэтому к рассеянию нейтронов поглощающим ядром можно применить оптическую формулу (92,1). Для того чтобы получить дифференциальное эффективное сечение рассеяния

нейтронов, нужно поток нейтронов, рассеянных в угол $d\Omega$, разделить на плотность потока падающих нейтронов $I/\pi R^2$. Тогда имеем

$$d\sigma = R^2 \left| \frac{J_1(kR\theta)}{\theta} \right|^2 d\Omega. \qquad (92,2)$$

Это выражение, конечно, может быть получено и из общей формулы (91,5).

Из условия «черноты» ядра следует, что коэффициент прилипания $\xi_l$ равен единице для тех $l$, при которых $\rho_l < R$, и $\xi_l = 0$, если $\rho_l > R$. Так как $\rho_l \sim \frac{\hbar}{p} l$ (см. § 91), то

$$S_l = \begin{cases} 0, & l < \frac{pR}{\hbar} = kR, \\ 1, & l > \frac{pR}{\hbar} = kR, \end{cases}$$

причем $kR \gg 1$.

Подставляя эти значения $S_l$ в (91,5), находим амплитуду упругого рассеяния

$$f(\theta) = -\frac{1}{2ik} \sum_{l=0}^{kR} (2l+1) P_l(\cos\theta).$$

Основную роль в сумме играют члены с большим $l$. Поэтому мы можем пренебречь единицей по сравнению с $2l$, а для полинома Лежандра $P_l(\cos\theta)$ использовать приближенное выражение, справедливое при $\theta \ll 1$ [1]),

$$P_l(\cos\theta) = J_0\left[\left(l + \frac{1}{2}\right)\theta\right] \simeq J_0(l\theta)$$

и перейти от суммирования по $l$ к интегрированию

$$f(\theta) = \frac{i}{k} \int_0^{kR} l J_0(l\theta)\, dl = \frac{iR}{\theta} J_1(kR\theta).$$

Отсюда сразу получаем для сечения выражение (92,2).

Рассмотрим подробнее зависимость дифференциального эффективного сечения (92,2) от угла рассеяния $\theta$. От азимутального угла дифференциальное эффективное сечение не зависит. Имеем, очевидно:

$$d\sigma = 2\pi R^2 \left| \frac{J_1(kR\theta)}{\theta} \right|^2 \sin\theta\, d\theta. \qquad (92,3)$$

[1]) См., например, Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, Квантовая механика, Физматгиз, 1963, стр. 206.

При малых углах $kR\theta < 1$, разлагая в ряд функцию Бесселя, находим $J_1(kR\theta) \approx \frac{kR\theta}{2}$. Следовательно, при малых углах эффективное сечение приобретает вид

$$d\sigma = \frac{k^2R^4}{4}\,d\Omega. \tag{92,4}$$

Оно оказывается не зависящим от угла рассеяния $\theta$.

При возрастании углов до значений, лежащих в интервале $1 \gg \theta \gg \frac{1}{kR}$, для бесселевой функции можно написать асимптотическое выражение

$$J_1(kR\theta) \approx \sqrt{\frac{2}{\pi kR\theta}}\,\sin\left(kR\theta - \frac{\pi}{4}\right).$$

В этой области углов эффективное сечение, осциллируя, быстро уменьшается с ростом $\theta$. Величина эффективного сечения в максимумах убывает пропорционально $1/\theta^3$.

Таким образом, эффективное сечение имеет резкий максимум для рассеяния под углом $\theta \approx 0$, т. е. при рассеянии вперед, по направлениям, близким к направлению падающего пучка.

Полное сечение рассеяния $\sigma$ можно найти, интегрируя (92,3) по всему телесному углу,

$$\sigma = 2\pi R^2 \int \frac{J_1^2}{\theta^2}\sin\theta\,d\theta.$$

Ввиду быстрой сходимости интеграла вклад, вносимый в его величину большими значениями $\theta$, мал и можно приближенно считать верхний предел интеграла бесконечным. Тогда, воспользовавшись формулой

$$\int_0^\infty \frac{J_1^2(x)}{x}\,dx = \frac{1}{2},$$

находим окончательно:

$$\sigma = \pi R^2. \tag{92,5}$$

Полное эффективное сечение рассеяния нейтронов с $\lambda\!\!\!^{-} \ll R$ совпадает с геометрическим сечением ядра.

Определим также полное сечение поглощения нейтронов ядром. Используя выражения для $S_l$ и подставляя их в формулу (91,6), получаем

$$\sigma_{\text{неупр}} = \frac{\pi}{k^2}\sum_{l=0}^{kR}(2l+1) = \pi R^2. \tag{92,6}$$

Следовательно, сечение поглощения нейтронов черным ядром также совпадает с геометрическим сечением ядра.

Из соотношений (92,5) и (92,6) следует, что полное взаимодействие нейтронов с ядром равно удвоенному геометрическому сечению ядра

$$\sigma_{\text{неупр}} + \sigma_{\text{упр}} = 2\pi R^2. \qquad (92,7)$$

С помощью аналогичных приемов можно также вычислить эффективные сечения рассеяния ядрами, лишь частично поглощающими падающие на них нейтроны, а также дифракционное рассеяние заряженных частиц на ядрах [1]).

## § 93. Рассеяние медленных частиц. Пороговое приближение

Применим полученные формулы фазовой теории рассеяния к нахождению эффективных сечений упругого и неупругого рассеяния медленных частиц. Под медленными, как и в § 86, мы будем понимать частицы, длина волны которых $\lambda$ велика по сравнению с размерами области взаимодействия. Мы ограничимся случаем, когда энергия взаимодействия убывает с расстоянием достаточно быстро, так что можно ввести эффективный размер области взаимодействия $a$.

Как мы уже видели в § 86, при малых энергиях существенно лишь $S$-рассеяние. Радиальная часть волновой функции, соответствующая моменту $l = 0$, удовлетворяет уравнению (35,8)

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial R_0}{\partial r}\right) + U(r)R_0 = ER_0.$$

Вводя волновое число $k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$, можно переписать последнее уравнение в виде

$$R_0'' + \frac{2}{r}R_0' + k^2R_0 - \frac{2m}{\hbar^2}U(r)R_0 = 0. \qquad (93,1)$$

При $r > a$, вне области взаимодействия, потенциальная энергия равна нулю и уравнение для функции $R_0$ приобретает вид

$$R_0'' + \frac{2}{r}R_0' + k^2R_0 = 0. \qquad (93,2)$$

Ясно, что потенциальная энергия обращается в нуль не резко, на некоторой границе, а в переходной области, где потенциальная энергия изменяется по некоторому сложному и обычно не известному закону.

Поэтому на первый взгляд нахождение функции во всем пространстве представляется задачей нереальной степени сложности. В действительности, однако, это не так.

[1]) Подробнее см. А. И. Ахиезер и И. Я. Померанчук, Некоторые вопросы теории ядра, Гостехиздат, 1950.

Оказывается, что можно воспользоваться большим значением $\lambda$ или, что то же самое, малым $k$ для существенного упрощения задачи. Именно, в области $r < a$, т. е. в области эффективного взаимодействия, можно пренебречь слагаемым $k^2$ как малым по сравнению с $\frac{2m}{\hbar^2} U(r)$. Тогда имеем

$$R_0'' + \frac{2}{r} R_0' - \frac{2m}{\hbar^2} U(r) R_0 = 0. \tag{93,3}$$

Решение уравнения (93,3) при заданной функции $U(r)$ можно написать в виде $R_0(r, c_1, c_2)$, где $c_1$ и $c_2$ — две произвольные постоянные. Поскольку в (93,3) не входит величина $k$, в области $r < a$ волновую функцию будем предполагать не зависящей от $k$.

Решением уравнения (93,2) служит

$$R_0 = \frac{1}{2ikr}(c_3 e^{ikr} + c_4 e^{-ikr}). \tag{93,4}$$

Здесь $c_3$ и $c_4$ — две постоянные интегрирования, не зависящие от $r$, но являющиеся, вообще говоря, функциями $k$.

В переходной области написать уравнение для волновой функции нельзя, поскольку здесь не известен ход потенциальной энергии. Однако ширина промежуточной области мала по сравнению с размером области взаимодействия и весьма мала по сравнению с длиной волны $\lambda$.

Между тем существенное изменение волновой функции происходит на длине волны. Поэтому можно пренебречь изменением волновой функции в переходной области и заменить эту область резкой границей при $r = a$. На этой поверхности оба решения должны плавно смыкаться.

Ясно, однако, что сомкнуть две функции, одна из которых зависит от $k$ как от параметра, а другая вовсе от $k$ не зависит, можно тогда, когда в окрестности границы области функция (93,4) также становится не зависящей от $k$.

При $r \sim a$ величина $ka$ мала по условию. Поэтому, разлагая экспоненты (93,4) в ряд по степеням $kr$ и ограничиваясь двумя первыми членами разложения, получаем

$$R_0 = \frac{c_3(k)(1 + ikr) + c_4(k)(1 - ikr)}{2ikr}. \tag{93,5}$$

Это выражение не будет зависеть от $k$ в том случае, когда выполняются соотношения

$$\left.\begin{aligned} c_4(k) + c_3(k) &= 2ika_2, \\ c_3(k) - c_4(k) &= 2a_1, \end{aligned}\right\} \tag{93,6}$$

где $a_1$ и $a_2$ — постоянные, не зависящие от $k$, величины.

Решая систему уравнений (97,6), находим для $c_3$ и $c_4$:

$$\left.\begin{aligned} c_4 &= -a_1 + ika_2, \\ c_3 &= ika_2 + a_1. \end{aligned}\right\} \qquad (93,7)$$

Сравнивая выражение (93,4) с (91,2), находим величину $S_0$. Она имеет вид

$$S_0 = -\frac{c_3}{c_4} = -\frac{a_1 + ika_2}{ika_2 - a_1}. \qquad (93,8)$$

Разлагая в ряд по малым значениям $k$, получаем

$$S_0 = 1 + 2ik\frac{a_2}{a_1}.$$

Используя формулы (91,6) и (91,7), находим выражение для эффективных сечений упругого и неупругого процессов:

$$\left.\begin{aligned} \sigma_{\text{упр}} &= \frac{\pi}{k^2}|1 - S_0|^2 = 4\pi\left|\frac{a_2}{a_1}\right|^2, \\ \sigma_{\text{неупр}} &= \frac{\pi}{k^2}(1 - |S_0|^2) = \frac{4\pi}{k}\operatorname{Im}\frac{a_2}{a_1}. \end{aligned}\right\} \qquad (93,9)$$

Из полученных формул следует, что эффективное сечение упругого рассеяния в рассмотренном случае не зависит от энергии рассеиваемой частицы. Эффективное сечение неупругого рассеяния обратно пропорционально волновому числу $k$, т. е. обратно пропорционально скорости частицы $v$.

Примененный нами прием пренебрежения шириной переходной зоны и замена уравнения (93,1) на уравнение (93,3) во внутренней области имеет весьма общий характер и носит название порогового приближения. Пороговое приближение с успехом применяется во всех случаях, когда длину волны можно считать большой по сравнению с шириной переходной области.

В дальнейшем мы встретимся еще с использованием порогового приближения.

## § 94. Формула Брейта — Вигнера

В предыдущих параграфах мы рассмотрели законы упругого рассеяния частиц, а также поглощения частиц. Теперь мы перейдем к изучению некоторых явлений, происходящих при ядерных реакциях типа

$$A + a \rightarrow B + b. \qquad (94,1)$$

Здесь $A$ и $B$ — начальное и конечное ядра, $a$ — падающая частица и $b$ — частица, вылетающая в результате реакции. Чтобы не учитывать усложнений, связанных с влиянием электрического

поля ядра, мы ограничимся случаем, когда падающая и вылетающая частицы являются нейтронами.

Изучение реакций, вызванных нейтронами со сравнительно небольшими энергиями, показало, что эффективное сечение реакции в зависимости от энергии падающих нейтронов обнаруживает максимумы при определенных значениях энергии. Явление имеет ярко выраженный резонансный характер — максимумы отвечают весьма узким интервалам энергии нейтронов.

Для объяснения резонансного характера ядерных реакций Н. Бором была предложена следующая общая схема протекания ядерных реакций: нейтрон $a$, проникающий в ядро, сильно взаимодействует с ядерными частицами и передает им свою избыточную энергию. Последняя равна, очевидно, сумме его кинетической энергии и энергии связи частицы в ядре $U_0$. Привнесенная нейтроном энергия быстро распределяется между всеми ядерными нуклонами, поскольку они сильно взаимодействуют между собой. В результате из ядра $A$ и нейтрона возникает новое, так называемое промежуточное ядро $C$. Промежуточное ядро не является стабильной системой, поскольку его энергия выше энергии нормального состояния на величину $E + U_0$. По прошествии некоторого времени жизни промежуточное ядро будет переходить в невозбужденное состояние. Этот переход может происходить при малых энергиях возбуждений двумя путями:

во-первых, в результате флуктуации на одной из ядерных частиц может сконцентрироваться вся энергия возбуждения. Эта частица (для простоты рассуждений — нейтрон) получает возможность вылететь из ядра, обладая при этом энергией $E$. Очевидно, что этот путь реакции отвечает упругому рассеянию нейтрона ядром;

во-вторых, энергия возбуждения может уноситься вылетающим нейтроном не полностью, а лишь частично. Остаток энергии возбуждения излучается системой ядерных частиц в виде $\gamma$-кванта. В этом случае имеет место неупругое рассеяние нейтрона. Частным случаем последней реакции служит реакция радиационного захвата нейтрона, при которой вся энергия возбуждения уносится $\gamma$-квантом и нейтрон остается в ядре.

Для эффективных сечений упругого и неупругого рассеяния можно воспользоваться формулами (91,6) и (91,7). Мы ограничимся при этом случаем медленных нейтронов, описываемых $S$-волной. Ядро будем считать сферой радиуса $R$. Хотя ядро нельзя считать имеющим резкую геометрическую границу, его размытость весьма мала по сравнению с длиной волны падающего нейтрона $\lambda \gg R$.

Нейтрон внутри ядра должен находиться в состоянии, которому отвечает длина волны $\lambda_{вн}$. На поверхности $r = R$ должно иметь место смыкание волновых функций, описывающих нейтрон

вне и внутри ядра. Для этого должны выполняться условия

$$\psi = \psi_{\text{вн}}, \qquad \frac{d\psi}{dr} = \frac{d\psi_{\text{вн}}}{dr}.$$

Из второго условия следует, что по порядку величины амплитуды волновых функций внешнего и внутреннего движения относятся как $\sim \frac{\lambda_{\text{вн}}}{\lambda}$. Это означает, что вероятность попадания частицы внутрь ядра $\sim \left(\frac{\lambda_{\text{вн}}}{\lambda}\right)^2$, т. е. весьма мала.

Лишь при особо малых значениях внутренней производной $\frac{d\psi_{\text{вн}}}{dr} \sim 0$, внутренняя амплитуда может оказаться порядка внешней. Это значит, что при определенных условиях, в частности при определенной энергии нейтрона, вероятность его проникновения внутрь ядра оказывается достаточно большой.

Соответствующая энергия определяется значением нормальной производной волновой функции на поверхности ядра.

Обозначим через $f(E)$ величину

$$f(E) = R\left(\frac{\frac{d}{dr}(r\psi)}{r\psi}\right)_{r=R}. \tag{94,2}$$

Величина $f(E)$ непосредственно связана с нормальной производной $\left(\frac{d\psi}{dr}\right)_{r=R}$ и зависит от энергии нейтрона $E$. Легко выразить через $f$ величину $S_0$, определяющую эффективное сечение упругого и неупругого рассеяния $s$-волны.

Подставляя в (94,2) значение $\psi$ из (91,2), находим

$$f = -i\,\frac{kRe^{-ikR} + kRS_0e^{ikR}}{e^{-ikR} - S_0e^{ikR}}.$$

Отсюда следует, что

$$S_0 = -e^{-2ikR}\,\frac{kR - if(E)}{kR + if(E)}. \tag{94,3}$$

Поскольку $f(E)$ является, вообще говоря, комплексной величиной, можно написать:

$$f(E) = f_1(E) - if_2(E), \tag{94,4}$$

где $f_1(E)$ и $f_2(E)$ — вещественные функции. Поскольку всегда $|S_0| \leqslant 1$, функция $f_2(E) \geqslant 0$.

С учетом (98,4), для $S_0$ имеем

$$S_0 = -e^{-2ikR}\,\frac{kR - if_1(E) - f_2(E)}{kR + if_1(E) + f_2(E)}. \tag{94,5}$$

Подставляя это значение $S_0$ в (91,6), находим

$$\sigma_{\text{неупр}} = \frac{\pi}{k^2}(1 - |S_0|^2) = \frac{4\pi}{k^2}\frac{kRf_2}{(kR+f_2)^2+f_1^2}. \qquad (94,6)$$

Аналогично из (91,7) следует

$$\sigma_{\text{упр}} = \frac{\pi}{k^2}|1 - S_0|^2 = \frac{\pi}{k^2}\left|1 + e^{-2ikR}\frac{kR - if_1 - f_2}{kR + if_1 + f_2}\right|^2 =$$

$$= \frac{4\pi}{k^2}\left|e^{-ikR}\frac{kR\cos kR - f_1\sin kR + if_2\sin kR}{kR + if_1 + f_2}\right|^2 =$$

$$= \frac{4\pi}{k^2}\left|\frac{kR}{i(kR+f_2) - f_1} + e^{ikR}\sin kR\right|^2. \qquad (94,7)$$

Обсудим прежде формулу для $\sigma_{\text{неупр}}$. Поскольку $f_2 > 0$, эффективное сечение имеет максимум при $f_1(E_0) = 0$. При энергии нейтрона, равной $E_0$, он с относительно большой вероятностью проникает внутрь ядра. Соответственно этому энергия $E_0$ отвечает резонансному значению энергии ядра. Вблизи резонансной энергии функцию $f_1(E)$ можно разложить в ряд по степеням $(E - E_0)$ и ограничиться первым членом разложения

$$f_1(E) = f'(E_0)(E - E_0).$$

Можно показать[1]), что величина $f'(E_0) < 0$. Введем обозначения:

$$\Gamma_e = -\frac{2kR}{f'(E_0)}; \quad \Gamma_r = -\frac{2f_2}{f'(E_0)}; \quad \Gamma = \Gamma_e + \Gamma_r. \qquad (94,8)$$

Тогда находим

$$\sigma_{\text{неупр}} \approx \frac{\pi}{k^2}\frac{\Gamma_e\Gamma_r}{(E-E_0)^2 + \frac{\Gamma^2}{4}}. \qquad (94,9)$$

В формуле (94,7) для $\sigma_{\text{упр}}$ при $E \approx E_0$ обычно первое слагаемое велико по сравнению со вторым и можно написать

$$(\sigma_e)_{\text{упр}} \approx \frac{\pi}{k^2}\frac{\Gamma_e^2}{(E-E_0)^2 + \frac{\Gamma^2}{4}}. \qquad (94,10)$$

Формулы для сечений упругого и неупругого рассеяния медленных нейтронов носят названия формул Брейта — Вигнера. Для выяснения физического смысла введенных величин $\Gamma_e$, $\Gamma_r$ и $\Gamma$ полезно сравнить формулы Брейта — Вигнера с дисперсионными формулами теории рассеяния света (§ 109). Мы видим, что общая структура формул совпадает. Это вполне естественно, так как формулы Брейта — Вигнера можно было бы получить,

[1]) См. А. И. Ахиезер и И. Я. Померанчук, Некоторые вопросы теории ядра, Гостехиздат, 1950, стр. 239.

рассматривая реакцию как переход системы (ядро + нейтрон) из начального в конечное состояние через некоторое промежуточное состояние — промежуточное ядро (т. е. по той же схеме, что и при рассеянии фотонов). Непосредственное применение теории возмущений приводит к формулам Брейта — Вигнера. Однако такой способ получения формул Брейта — Вигнера нельзя считать обоснованным, поскольку возмущение состояния нейтрона нельзя считать слабым.

Тем не менее такое наглядное, но нестрогое вычисление показывает, что величины $\Gamma_e$ и $\Gamma_r$ характеризуют вероятности переходов. Именно, $\Gamma_e$ пропорциональна матричному элементу перехода системы из промежуточного состояния (ядро $C$) в конечное (ядро $A$ и нейтрон с энергией $E$). Поэтому величина $\Gamma_e$, которую называют частичной шириной резонансного уровня $E$, отвечающей упругому рассеянию, определяет вероятность распада ядра $C$ с упругим рассеянием нейтрона. $\Gamma_r$ называется частичной шириной резонансного уровня по отношению к реакции. Она определяет вероятность распада ядра с неупругим рассеянием и захватом нейтрона. В случае медленных нейтронов вероятность неупругого рассеяния мала и реакция сводится к захвату нейтрона. Наконец, $\Gamma$ определяет полную вероятность распада ядра $C$. Она равна энергетической полуширине резонансного максимума сечения.

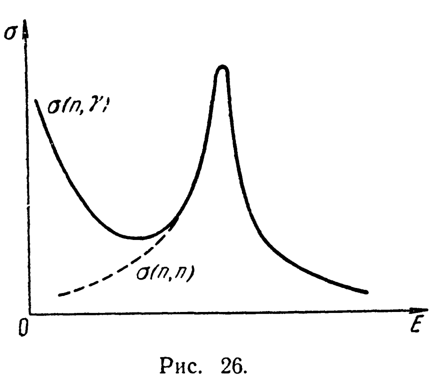


Рис. 26.

На рис. 26 приведена зависимость эффективных сечений процессов упругого рассеяния $\sigma(n, n)$ и радиационного захвата медленных нейтронов $\sigma(n, \gamma)$. Формулы Брейта — Вигнера были выведены нами в частном случае, когда энергия нейтрона близка к одному из резонансных уровней ядра $E_0$. Они могут быть обобщены на случай многих уровней. В них могут быть учтены также спиновые состояния ядра и легких частиц. Наконец, формулы Брейта — Вигнера могут быть обобщены на случай заряженных частиц и частиц с моментом. Обсудим некоторые свойства ширин резонансного уровня ядра. Ширина реакции $\Gamma_r$ для медленных нейтронов сводится к ширине радиационного захвата $\Gamma_\gamma$, поскольку неупругое рассеяние при малых энергиях не происходит. Величина $\Gamma_\gamma$ составляет около $10^{-1}$ *эв* и не зависит от скорости нейтрона. Ширина $\Gamma_e \sim k \sim v$, где $v$ — скорость нейтрона и при малых энергиях у тяжелых и средних ядер $\Gamma_e \ll \Gamma_r$. Это означает, что захват

нейтронов преобладает над упругим рассеянием. У легких ядер наблюдается обратная картина — резонансное рассеяние преобладает над захватом.

Представления Бора об образовании промежуточного ядра справедливы для ядерных реакций, происходящих при не слишком больших энергиях. С ростом энергии падающих частиц их сечение рассеяния на отдельных ядерных нуклонах резко уменьшается. Поэтому при энергиях $E > 50—100$ *Мэв* взаимодействие частиц с ядром сводится к взаимодействию с отдельным ядерным нуклоном. Формулы Брейта — Вигнера оказываются более неприменимыми.

## § 95. Матрица рассеяния (*S*-матрица)

Изложенный выше расчетный аппарат теории рассеяния связан с заданием явного вида распределения потенциала взаимодействия во всем пространстве. Между тем в ряде важных случаев потенциальная энергия (не зависящая от скорости) не существует. Поэтому в современной теории рассеяния важную роль играет более общая постановка задачи. Именно, пусть задана волновая функция системы частиц $\psi_a(t \to -\infty)$ в начальном состоянии до взаимодействия. Общая задача теории рассеяния заключается в нахождении волновой функции системы по прошествии большого времени после взаимодействия $\psi(t \to \infty)$. Волновая функция $\psi(t \to \infty)$ может быть выражена через начальную функцию $\psi_a(t \to -\infty)$ с помощью оператора $\hat{V}(t, t_0)$, введенного в § 49 и описывающего эволюцию волновой функции во времени. Назовем матрицей рассеяния $S$ предельное выражение оператора $\hat{V}(t, t_0)$, описывающего развитие процесса во времени (см. § 49)

$$\hat{S} = \lim_{\substack{t_0 \to -\infty \\ t \to \infty}} \hat{V}(t, t_0). \tag{95,1}$$

Таким образом, матрица рассеяния $S$ осуществляет преобразование начального состояния $\psi_a(-\infty)$ в конечное состояние $\psi(\infty)$:

$$\psi(\infty) = \hat{S}\psi_a(-\infty). \tag{95,2}$$

Индексом $a$ мы обозначили совокупность квантовых чисел (полный набор), определяющих состояние системы до рассеяния. Предполагается, что как в начальном, так и в конечном состоянии частицы разведены на достаточно большие расстояния друг от друга, так что можно не учитывать взаимодействия между ними (так называемая адиабатическая гипотеза).

Разложим функцию $\psi$ в ряд по некоторой полной системе функций $\psi_b$, где через $b$ мы обозначим соответствующий набор

квантовых чисел

$$\psi = \sum_b c_b \psi_b.$$

Знак $\sum\limits_b$ означает суммирование по квантовым числам, пробегающим дискретный ряд значений и интегрирование по квантовым числам, изменяющимся непрерывным образом.

Коэффициенты разложения $c_b$ выражаются, как это следует из (95,2), через матричные элементы оператора $\hat{S}$:

$$c_b = (\psi_b,\ \psi) = (\psi_b,\ \hat{S}\psi_a) = \langle b | S | a \rangle = S_{ba}. \tag{95,3}$$

Квадрат модуля амплитуды $c_b$ дает полную вероятность перехода системы при рассеянии из состояния $a$ в состояние $b$

$$W'_{ba} = | S_{ba} |^2. \tag{95,4}$$

Таким образом, матричные элементы оператора $\hat{S}$ непосредственно связаны с соответствующими вероятностями перехода.

Поскольку оператор $\hat{V}(t, t_0)$ унитарен (см. § 49), унитарно и его предельное значение, т. е. для оператора $\hat{S}$ можно написать

$$\hat{S}\hat{S}^+ = \hat{S}^+\hat{S} = \hat{I}, \tag{95,5}$$

где через $\hat{I}$ обозначен единичный оператор.

Беря диагональные матричные элементы одного из соотношений (95,5), получаем очевидный результат

$$\sum_b S^+_{ab} S_{ba} = \sum_b | S_{ba} |^2 = 1, \tag{95,6}$$

т. е. сумма вероятностей всех возможных переходов равна единице. Основываясь на соотношении (95,4), можно выразить эффективное сечение процесса через матричные элементы оператора $\hat{S}$. Однако предварительно необходимо получить выражение для вероятности перехода в единицу времени.

Предположим, что начальное состояние $\psi_a$ характеризуется определенным значением энергии $E_a$. Полная энергия системы сохраняется во времени. Поэтому матрицу $S_{ba}$ можно представить в виде

$$S_{ba} = S^E_{ba}\, \delta(E_a - E_b).$$

О матрице $S^E_{ba}$ говорят, что она задана на энергетической поверхности. Тогда полная вероятность перехода (95,4) запишется в виде

$$W'_{ba} = | S^E_{ba} |^2\, \delta^2 (E_a - E_b). \tag{95,7}$$

Эта вероятность пропорциональна квадрату δ функции. Одну из δ функций представим в виде (см. приложение III, т. I)

$$\delta(E_a - E_b) = \lim_{T\to\infty} \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}} \exp \frac{i}{\hbar}(E_a - E_b)\, t\, dt.$$

Подставляя это выражение в (95,7) и интегрируя вероятность перехода по энергии конечного состояния, получим вероятность перехода за время $T$:

$$\overline{W}_{ba} = \int W'_{ba}\, dE_b = \frac{1}{2\pi\hbar} \left| S^E_{ab} \right|^2 T. \tag{95,8}$$

Отсюда находим для вероятности перехода в единицу времени

$$W = \frac{1}{2\pi\hbar} \left| S^E_{ba} \right|^2. \tag{95,9}$$

Для нахождения сечения процесса мы должны разделить вероятность перехода на плотность потока падающих частиц. В начальном состоянии имеются две частицы. Процесс рассеяния рассматриваем, как обычно, в системе центра тяжести. Волновая функция начального состояния $\psi_a$ описывает состояния с заданной энергией относительного движения $E_a$ и направлением импульса относительного движения $\boldsymbol{n}_a = \frac{\boldsymbol{p}_a}{p_a}$ и нормирована условием

$$\int \psi^*_{E_a n} \psi_{E'_a n'}\, dV = \delta(E_a - E'_a)\, \delta(\boldsymbol{n}_a - \boldsymbol{n}'_a) = p_a^2 \frac{dp}{dE}\, \delta(\boldsymbol{p}_a - \boldsymbol{p}'_a). \tag{95,10}$$

Тогда

$$\psi_{E_a n} = |E_a, \boldsymbol{n}\rangle = p_a \sqrt{\frac{dp}{dE}}\, \psi_{p_a} = \frac{p_a}{\sqrt{v_a}} |\boldsymbol{p}_a\rangle. \tag{95,11}$$

При этом плотность потока падающих частиц равна

$$\boldsymbol{j}_0 = \frac{p_a^2}{(2\pi\hbar)^3}\, \boldsymbol{n}_a. \tag{95,12}$$

Как всегда, когда мы имеем дело с непрерывно изменяющейся величиной, мы должны ввести дифференциальную вероятность перехода $dW_{ba}$ и, следовательно, дифференциальное эффективное сечение $d\sigma_{ba}$. Обозначая через $d\Omega_b$ интервал телесного угла, в котором лежит вектор $\boldsymbol{n}_b$, получаем из (95,9) и (95,12)

$$d\sigma_{ba} = \frac{4\pi^2}{k_a^2} \left| \langle b, E, \boldsymbol{n}_b | S^E | a, E, \boldsymbol{n}_a\rangle \right|^2 d\Omega_b, \tag{95,13}$$

где $k_a = \frac{1}{\hbar} p_a$.

Рассмотрим теперь случай, когда в результате взаимодействия двух частиц может происходить упругое и различные виды неупругого рассеяния, т. е.

$$A+B\to\begin{cases}A+B\\C+D\\C'+D'\end{cases}$$

Каждый вид превращения мы будем называть каналом реакции. Формула (95,13) при $b\neq a$ отвечает неупругому каналу реакции. Сечение с учетом упругого и неупругого каналов можно представить в виде

$$d\sigma_{ba}=\frac{4\pi^2}{k_a^2}\,|\langle b,\ E,\ \boldsymbol{n}_b|S^E-I|a,\ E,\ \boldsymbol{n}_a\rangle|^2\,d\Omega_b, \qquad (95,14)$$

где $I$ — единичная матрица. Поскольку у матрицы $I$ отличны от нуля только диагональные элементы, при $b\neq a$ сечение (95,14) совпадает с (95,13).

Выражения (95,13) и (95,14) можно представить в виде, аналогичном (86,12), если разложить начальное состояние $|a, E, \boldsymbol{n}_a\rangle$ по парциальным волнам

$$|a,\ E,\ \boldsymbol{n}_a\rangle=|a,\ E,\ l,\ m\rangle\langle l,\ m|\boldsymbol{n}_a\rangle. \qquad (95,15)$$

Функции преобразования $\langle l, m|\boldsymbol{n}_a\rangle$ были найдены в § 48:

$$\langle l,\ m|\boldsymbol{n}_a\rangle=Y^*_{lm}(\boldsymbol{n}_a). \qquad (95,16)$$

Выбирая ось $z$ вдоль направления вектора $\boldsymbol{n}_a$, получаем

$$Y_{lm}(\boldsymbol{n}_a)=Y_{lm}(0)=\sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}}\ \delta_{m0}. \qquad (95,17)$$

При подстановке выражений (95,16), (95,17) в (95,13) и (95,14) возникнут матричные элементы вида

$$\langle b,\ E,\ \boldsymbol{n}_b|S^E|a,\ E,\ l,\ 0\rangle.$$

При движении в центральном поле момент количества движения сохраняется. Поэтому $S$-матрица диагональна по квантовым числам $l$, $m$ и можно написать

$$\langle b,\ E,\ \boldsymbol{n}_b|S^E|a,\ E,\ l,\ 0\rangle=\langle\boldsymbol{n}_b|l,\ 0\rangle\langle b,\ E,\ l,\ 0|S^E|a,\ E,\ l,\ 0\rangle=$$
$$=Y_{l0}(\boldsymbol{n}_b)\langle b,\ E,\ l,\ 0|S^E|a,\ E,\ l,\ 0\rangle=$$
$$=P_l(\cos\theta_b)\sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}}\ S^l_{ba}. \qquad (95,18)$$

Соответственно для дифференциального сечения рассеяния в телесный угол $d\Omega_b$ получаем

$$d\sigma_{ba} = \frac{1}{4k_a^2}\left|\sum_l (2l+1)\left(S_{ba}^l - \delta_{ba}\right) P_l(\cos\theta)\right|^2 d\Omega_b. \qquad (95,19)$$

Интегрируя это выражение по всем направлениям вектора $\boldsymbol{n}_b$, получим эффективное сечение рассеяния $a \to b$

$$\sigma_{ba} = \frac{\pi}{k_a^2}\sum_l (2l+1)\left|S_{ba}^l - \delta_{ba}\right|^2. \qquad (95,20)$$

Из последней формулы следует, что полное сечение упругого рассеяния имеет вид

$$\sigma_{aa} = \frac{\pi}{k_a^2}\sum_l (2l+1)\left|S_{aa}^l - 1\right|^2. \qquad (95,21)$$

Напишем выражение также для полного сечения всех неупругих процессов $\sigma_{\text{неупр}}$, которое получается суммированием $\sigma_{ba}$ по всем каналам $b \neq a$

$$\sigma_{\text{неупр}} = \sum_{b\neq a} \sigma_{ba} = \frac{\pi}{k_a^2}\sum_{b\neq a}\sum_l (2l+1)\left|S_{ba}^l\right|^2.$$

Это выражение можно преобразовать, воспользовавшись унитарностью $S$-матрицы. Именно, имеем, очевидно,

$$\sum_{b\neq a}\left|S_{ba}^l\right|^2 = 1 - \left|S_{aa}^l\right|^2. \qquad (95,22)$$

Соответственно для $\sigma_{\text{неупр}}$ получаем

$$\sigma_{\text{неупр}} = \frac{\pi}{k_a^2}\sum_l (2l+1)\left(1 - \left|S_{aa}^l\right|^2\right). \qquad (95,23)$$

Формулы (95,23) и (95,21) совпадают с формулами (91,6) и (91,7) фазовой теории рассеяния. Мы видим, что введенные в § 91 величины $S^l$ являются диагональными матричными элементами матрицы рассеяния $S$. Если неупругие процессы невозможны, т. е. $S_{ba}^l = 0$ при $b \neq a$, то из соотношения унитарности (95,22) следует, что $\left|S_{aa}^l\right|^2 = 1$, т. е.

$$S_{aa}^l = e^{2i\delta_l}. \qquad (95,24)$$

При этом выражения (95,19)—(95,21) совпадают с выражениями для сечения упругого рассеяния, полученного в § 86.

Из соотношений (95,19), (95,21) и (95,22) следует, что эффективное сечение процесса определяется матричными элементами оператора $\hat{F}$, $i\hat{F} = \hat{S} - \hat{I}$ (множитель $i$ введен для

удобства). Унитарность $S$-матрицы приводит к следующему соотношению:

$$\hat{S}^{+}\hat{S}=(\hat{I}-i\hat{F}^{+})(\hat{I}+i\hat{F})=\hat{I}$$

или

$$-i\hat{F}+i\hat{F}^{+}=\hat{F}^{+}\hat{F}.$$

Беря матричные элементы от левой и правой частей этого соотношения по волновым функциям (95,11), получим

$$\hat{F}_{ba}-\hat{F}^{+}_{ba}=i\sum_{c}\hat{F}^{+}_{bc}\hat{F}_{cb}; \qquad (95,25)$$

$\sum\limits_{c}$ означает суммирование по дискретным и интегрирование по непрерывным состояниям системы двух частиц после столкновения. Фактически система (95,25) является системой интегральных уравнений, выражающих свойство унитарности $S$-матрицы.

Система уравнений (95,25) существенно упрощается, если возможно только упругое рассеяние. В этом случае матричные элементы оператора $\hat{F}$, как это видно из сравнения (95,19), (86,11) и (86,12), совпадают с точностью до множителя с амплитудой упругого рассеяния $f(\boldsymbol{n}',\boldsymbol{n})$:

$$\frac{2\pi}{k}\hat{F}_{\boldsymbol{n}',\boldsymbol{n}}=f(\boldsymbol{n}',\boldsymbol{n}), \qquad (95,26)$$

где $\boldsymbol{n}$ и $\boldsymbol{n}'$ — единичные векторы, характеризующие направление вектора импульса относительного движения падающих и рассеянных частиц. Из (95,25) получаем

$$f(\boldsymbol{n}',\boldsymbol{n})-f^{*}(\boldsymbol{n},\boldsymbol{n}')=\frac{ik}{2\pi}\int f^{*}(\boldsymbol{n}'',\boldsymbol{n}')f(\boldsymbol{n}'',\boldsymbol{n})\,d\Omega''. \qquad (95,27)$$

Соотношение (95,27) выражает условие унитарности для упругого рассеяния. При рассеянии в центральном поле амплитуда $f$ зависит только от угла $\vartheta$ между векторами $\boldsymbol{n}$ и $\boldsymbol{n}'$ и соотношение (95,27) может быть переписано в виде

$$\operatorname{Im} f(\boldsymbol{n}',\boldsymbol{n})=\frac{k}{2\pi}\int f^{*}(\boldsymbol{n}'',\boldsymbol{n}')f(\boldsymbol{n}'',\boldsymbol{n})\,d\Omega''. \qquad (95,28)$$

При $\boldsymbol{n}=\boldsymbol{n}'$ мы получаем соотношение, связывающее мнимую часть амплитуды рассеяния на угол нуль с полным сечением (оптическая теорема; см. § 91).

Отметим, что уравнение (95,28) дает возможность, в принципе, найти фазу амплитуды рассеяния, если известен ее модуль, который определяется законом рассеяния. Полагая

$$f(\vartheta)=\sqrt{d\sigma/d\Omega}\,e^{i\alpha(\vartheta)}$$

и подставляя это выражение в (95,28), мы получаем интегральное уравнение для фазы $\alpha(\vartheta)$. Таким образом, зная сечение рассеяния $d\sigma/d\Omega$, мы можем, в принципе, определить и амплитуду рассеяния $f(\vartheta)$. Отметим, однако, что уравнение (95,28) не изменяется при замене $\alpha \to \pi - \alpha$, т. е. оно определяет амплитуду рассеяния с точностью до преобразования $f(\vartheta) \to -f^*(\vartheta)$. Рассмотрим теперь влияние этой неопределенности на величину фазы рассеяния. Для этого вычислим интеграл

$$\int |f(\theta)| e^{i\alpha(\theta)} P_{l'}(\cos\theta)\sin\theta\, d\theta = \\ = \frac{1}{2ik}\sum_{l=0}^{\infty}\int (2l+1)\left(e^{2i\delta_l}-1\right) P_l P_{l'}\sin\theta\, d\theta$$

Используя свойства ортогональности полиномов Лежандра, получаем

$$\int |f(\theta)| e^{i\alpha(\theta)} P_{l'}(\cos\theta)\sin\theta\, d\theta = \frac{1}{ik}\left(e^{2i\delta_{l'}} - 1\right). \tag{95,29}$$

Приравнивая действительные части соотношения (95,29), находим

$$\int |f(\theta)| \cos\alpha(\theta)\, P_l(\cos\theta)\, d\cos\theta = \frac{\sin 2\delta_l}{k}. \tag{95,30}$$

Из формулы (95,30) ясно, что замена $\alpha$ на $\pi - \alpha$ приводит к изменению знака левой части. Для сохранения равенства необходимо изменить знак всех фаз $\delta_l$ на обратный. Итак, неопределенность в величине $\alpha$ приводит к неопределенности в знаке всех фаз.

Если определить независимым образом знак хотя бы у одной из фаз, то связь $\delta_l$ со всеми остальными фазами становится однозначной. Знак одной (а именно нулевой) фазы может быть установлен, например, из изучения рассеяния и интерференции медленных частиц. Следует указать, что хотя приведенные расчеты убеждают нас в возможности определения амплитуды рассеяния, решение интегрального уравнения (95,28) является трудной задачей.

## § 96. S-матрица и теория возмущений

Если полный гамильтониан можно представить в виде суммы

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}',$$

где $\hat{H}_0$ описывает поведение невзаимодействующих частиц, и $\hat{H}'$ — их взаимодействие, то для нахождения явного вида $S$-матрицы удобно воспользоваться представлением взаимодействия.

Волновая функция в этом представлении определена уравнением (49,21). Оператор $\hat{V}(t, t_0)$, даваемый формулой (49,1), который по определению, переводит волновую функцию, заданную в момент времени $t_0$, в волновую функцию в момент времени $t$, можно написать и в представлении взаимодействия. Именно,

$$\varphi(t) = \hat{V}(t, t_0)\,\varphi(t_0); \tag{96,1}$$

подставляя в (49,21), находим

$$i\hbar\frac{\partial\hat{V}(t, t_0)}{\partial t} = \hat{H}'_{\text{int}}(t)\,\hat{V}(t, t_0), \tag{96,2}$$

$$\hat{V}(t_0, t_0) = 1. \tag{96,3}$$

Системе (96,2) и (96,3) можно сопоставить интегральное уравнение

$$\hat{V}(t, t_0) = 1 - \frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} dt'\hat{H}'_{\text{int}}(t')\,\hat{V}(t', t_0). \tag{96,4}$$

Интегральное уравнение (96,4) может быть решено по методу последовательных приближений:

$$\hat{V}(t, -\infty) = 1 - \frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{t} dt_1\hat{H}'_{\text{int}}(t_1) + \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2\int_{-\infty}^{t} dt_1\int_{-\infty}^{t_1} dt_2\hat{H}'_{\text{int}}(t_1)\,\hat{H}'_{\text{int}}(t_2) + \ldots \tag{96,5}$$

Общий член ряда имеет вид

$$\hat{V}^{(n)} = \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^n\int_{-\infty}^{t} dt_1\int_{-\infty}^{t_1} dt_2\ldots\int_{-\infty}^{t_{n-1}}\hat{H}'_{\text{int}}(t_1)\,\hat{H}'_{\text{int}}(t_2)\ldots\hat{H}'_{\text{int}}(t_n)\,dt_n. \tag{96,6}$$

Очевидно, что области интегрирования по переменным $t_1, t_2, \ldots, t_n$ располагаются в порядке

$$t_1 > t_2 > \ldots > t_n. \tag{96,7}$$

Для того чтобы упростить запись и получить возможность не следить за порядком выполнения интегрирования, удобно симметризовать формулу (96,6). В случае функции, симметричной относительно своих переменных, можно воспользоваться известной формулой

$$\int_a^b dt_1\int_a^{t_1} dt_2\ldots\int_a^{t_{n-1}} dt_n f(t_1, \ldots, t_n) = \frac{1}{n!}\int_a^b dt_1\int_a^b dt_2\ldots\int_a^b dt_n f(t_1, \ldots, t_n). \tag{96,8}$$

С указанной целью введем так называемый хронологический оператор $P$, который, по определению, располагает зависящие от времени операторы в хронологической последовательности, т. е. в порядке убывания времени (96,7):

$$PL(t_1)\,M(t_2)=\begin{cases} L(t_1)\,M(t_2) & \text{при} \quad t_1>t_2,\\ M(t_2)\,L(t_1) & \text{при} \quad t_2>t_1. \end{cases} \tag{96,9}$$

Представлением этого оператора может служить, например, выражение

$$P=\frac{1+\varepsilon(t_1-t_2)}{2}+\frac{1-\varepsilon(t_1-t_2)}{2},$$

где $\varepsilon(x)$ — так называемая знаковая функция

$$\varepsilon(x)=\frac{|x|}{x}=\begin{cases} 1 & \text{при} \quad x>0,\\ -1 & \text{при} \quad x<0. \end{cases}$$

С помощью хронологического оператора можно написать

$$\int\limits_{-\infty}^{t} dt_1 \int\limits_{-\infty}^{t_1} dt_2 \ldots \int\limits_{-\infty}^{t_{n-1}} dt_n \hat{H}'_{\text{int}}(t_1) \ldots \hat{H}'_{\text{int}}(t_n)=$$

$$=\frac{1}{n!}\int\limits_{-\infty}^{t} dt_1 \int\limits_{-\infty}^{t} dt_2 \ldots \int\limits_{-\infty}^{t} dt_n P\{\hat{H}'_{\text{int}}(t_1)\ldots\hat{H}'_{\text{int}}(t_n)\}. \tag{96,10}$$

Поэтому для $\hat{V}(t,\,-\infty)$ находим

$$\hat{V}(t,\,-\infty)=1+\sum_n\left(-\frac{i}{\hbar}\right)^n\frac{i}{n!}\int\limits_{-\infty}^{t} dt_1 \ldots$$

$$\ldots\int\limits_{-\infty}^{i} dt_n P\{\hat{H}'_{\text{int}}(t_1)\ldots\hat{H}'_{\text{int}}(t_n)\}=P\exp\left\{-\frac{i}{\hbar}\int\limits_{-\infty}^{t}\hat{H}'_{\text{int}}(t)\,dt\right\}.$$

В соответствии с определением $S$-матрицы

$$S=\lim_{\substack{t\to\infty\\ t_0\to\infty}}\hat{V}(t,\,t_0)=\lim_{t\to\infty}\hat{V}(t,\,-\infty)=P\exp\left\{-\frac{i}{\hbar}\int\limits_{-\infty}^{\infty}\hat{H}'_{\text{int}}(t)\,dt\right\}. \tag{96,11}$$

Полученная формула, именуемая формулой Дайсона, позволяет связать $S$-матрицу с энергией взаимодействия $\hat{H}'$ (если последняя существует). Она является точной в том смысле, что в ней выполнено суммирование всего ряда теории возмущений.

Нетрудно убедиться, что первые члены разложения общей формулы для $S$-матрицы приводят к обычной теории возмущений.

Для простоты выкладок ограничимся первым порядком теории возмущений, написав

$$S^{(1)} = 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dt\, \hat{H}'_{\text{int}}(t).$$

Оператор $P$ в этом случае тождественно равен единице. Беря матричный элемент по состояниям $a \neq b$, которые являются собственными состояниями гамильтониана $H_0$, имеем

$$S_{ba} = -\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dt\, (\hat{H}'_{\text{int}})_{ba}.$$

Переходя к представлению Шредингера и пользуясь определением (49,19), получаем

$$S_{ba}^{(1)} = -\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dt\, \langle b \left| \exp\left(\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0 t\right) \hat{H}' \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0 t\right) \right| a \rangle =$$

$$= -\frac{i}{\hbar} \langle b | \hat{H}' | a \rangle \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left[\frac{i}{\hbar}(E_b - E_a)t\right] dt = 2\pi i \hat{H}'_{ba} \delta(E_b - E_a).$$

Мы видим, что $S'_{ba}$ совпадает с амплитудой перехода в первом приближении теории возмущений.

Аналогичные, хотя и более громоздкие вычисления, позволяют отождествить $S_{ba}^{(2)}$ с амплитудой перехода во втором порядке теории возмущений.

Несмотря на удобство записи формулы Дайсона, которой часто пользуются в промежуточных выкладках, для фактического вычисления $S$-матрицы приходится проводить разложение в ряд и выполнять почленное интегрирование.

Важной особенностью формулы Дайсона является то, что она легко может быть преобразована к релятивистски-инвариантному виду. Поэтому она имеет особенно большое значение при расчете релятивистских эффектов.

## § 97. Аналитические свойства $S$-матрицы

Как мы уже подчеркивали, с помощью аппарата $S$-матрицы может быть получен ряд важных результатов теории рассеяния, не связанных с использованием конкретного вида потенциала взаимодействия. Это связано, в частности, с изучением аналити-

ческих свойств $S$-матрицы[1]). В дальнейшем для простоты выкладок мы ограничимся случаем упругого рассеяния. При этом элементы $S$-матрицы даются формулой (95,24).

Как было показано в § 35, асимптотическое выражение для регулярной в нуле радиальной составляющей волновой функции частицы с энергией $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ и моментом $l$ имеют вид

$$\chi_{kl} = rR_{kl} = a_l(k) \exp\left[i\left(kr - \frac{l\pi}{2}\right)\right] + b_l(k) \exp\left[-i\left(kr - \frac{l\pi}{2}\right)\right]. \tag{97,1}$$

При выводе (97,1) предполагалось, что потенциал спадает на больших расстояниях быстрее, чем по закону $\frac{1}{r}$.

Сравнивая выражение (97,1) с (86,2) и учитывая (95,24), можно выразить матричные элементы $S^l_{aa} \equiv S_l$ через постоянные $a_l(k)$ и $b_l(k)$:

$$S_l(k) = -\frac{a_l(k)}{b_l(k)}. \tag{97,2}$$

Будем теперь формально считать волновую функцию $\chi_{kl}$ и соответственно функцию $S_l(k)$ функциями комплексного переменного $k$. Покажем прежде всего, что функцию комплексного переменного $S_l(k)$ следует задать лишь в одном квадранте, а не на всей плоскости комплексного переменного $k$. Действительно, поскольку уравнение Шредингера не изменяется при замене $k$ на $-k$, функция $\chi_{-kl}$, в силу единственности решения, описывает то же состояние, что и функция $\chi_{kl}$. Обе эти функции могут различаться лишь постоянным множителем. Заменяя в (97,1) $k$ на $-k$, получаем

$$\frac{a_l(k)}{b_l(k)} = \frac{b_l(-k)}{a_l(-k)}.$$

Отсюда следует, что

$$S_l(k) = S_l^{-1}(-k). \tag{97,3}$$

Отметим далее, что так как уравнение Шредингера вещественно, функция $\overset{*}{\chi}_{kl}$ также должна совпадать, с точностью до постоянной, с функцией $\chi_{kl}$. Отсюда снова легко получить, что

$$S_l(k) = \left(S_l^*(k)\right)^{-1} \tag{97,4}$$

Формула (97,4) получена для вещественных $k$. Совершая аналитическое продолжение на всю плоскость комплексных $k$,

---

[1]) Более подробное рассмотрение затронутых в этом параграфе вопросов и библиографию см. в книге А. И. Базь, Я. Б. Зельдович, А. М. Переломов, Рассеяние, реакции и распады в нерелятивистской квантовой механике, изд. 2-е, «Наука», 1971.

имеем

$$S_l(k) = \left(S_l^*(k^*)\right)^{-1}. \tag{97,5}$$

Соотношения (97,3), (97,5) связывают значения функции $S_l(k)$, заданных в одном из квадрантов плоскости комплексного переменного $k$ с ее значениями в соответствующих точках остальных трех квадрантов. Из соотношения (97,4) следует, что при вещественном $k$ $|S_l(k)|^2 = 1$, т. е фаза $\delta_l$ вещественна $(S_l = e^{2i\delta_l})$. Наоборот, на мнимой оси, как видно из (97,5) и (97,3), функция $S_l(k)$ вещественна, так что фаза $\delta_l$ является мнимой.

Рассмотрим расположение особенностей функции $S_l(k)$. Предположим, потенциалу $U(r)$ отвечает связанное состояние частицы с энергией $-E_0$. Связанное состояние описывается волновой функцией $\chi_{k_0 l}$, регулярной в нуле и затухающей на больших расстояниях как $e^{-|k_0|r}$, где $k_0 = i\sqrt{2m|E_0|/\hbar^2}$. Следовательно, функция $\chi_{kl}$, аналитически продолженная на комплексную плоскость, должна затухать при $k = k_0$ как $e^{-|k_0|r}$. Поэтому в точке $k = k_0$ должно выполняться соотношение $b_l(k_0) = 0$. В соответствии с формулой (97,2) функция $S_l(k)$ имеет в точке $k = k_0$ полюс. В симметричной точке, расположенной в нижней полуплоскости, т. е. при $k = -k_0$, функция $S_l(k)$, как это следует из (97,3), обращается в нуль. Таким образом, мы приходим к выводу, что каждому связанному состоянию отвечает полюс функции $S_l(k)$, расположенный в соответствующей точке верхней мнимой полуоси на плоскости комплексного переменного $k$. Следует отметить, что на мнимой полуоси могут возникать и так называемые «ложные» полюсы, не отвечающие никакому стационарному состоянию. Можно показать (см. сноску на стр. 405), что «ложные» полюсы не возникают при введении так называемого радиуса обрезания $R$, т. е. при введении условия $U(r) = 0$ при $r > R$, где радиус $R$ может быть сколь угодно большим.

Отметим, что функция $S_l(k)$ не может иметь полюсов в верхней полуплоскости, расположенных где-либо вне мнимой полуоси. Действительно, такому полюсу отвечало бы комплексное значение энергии связанного состояния, что невозможно.

Функция $S_l(k)$ может иметь полюсы и в нижней полуплоскости, причем здесь они могут располагаться и не на мнимой полуоси. Как это сразу следует из соотношений (97,3), (97,5), эти полюсы должны располагаться парами, симметрично относительно мнимой полуоси. В верхней полуплоскости этим полюсам отвечают нули функции $S_l(k)$. Легко видеть, что полюсам, расположенным в нижней полуплоскости, отвечает волновая функция, экспоненциально возрастающая на больших расстояниях. Такая волновая функция, конечно, не может отвечать связан-

ному состоянию. Можно показать, что полюсам в нижней полуплоскости отвечают квазистационарные состояния системы, т. е. состояния, распадающиеся в течение некоторого конечного времени $T$.

Найдем вычет функции $S_l(k)$ относительно полюса, которому отвечает связанное состояние с энергией $E = -E_0$ или значение $k = k_0 = i\sqrt{2m|E_0|/\hbar^2}$. Обозначая этот вычет через $c_l$, представим функцию $S_l(k)$ в окрестности точки $k = k_0$ в виде

$$S_l = \frac{c_l}{k - k_0}. \tag{97,6}$$

Величина $c_l$ связана простым соотношением с амплитудой волновой функции, отвечающей стационарному состоянию с энергией $E = -E_0$. Чтобы установить это соотношение, напишем уравнения, которым удовлетворяет функция $\chi_{kl}$ и ее производная по энергии:

$$\chi''_{kl} + \frac{2m}{\hbar^2}\left(E - U - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}\right)\chi_{kl} = 0,$$

$$\left(\frac{\partial \chi_{kl}}{\partial E}\right)'' + \frac{2m}{\hbar^2}\left(E - U - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}\right)\frac{\partial \chi_{kl}}{\partial E} = -\frac{2m}{\hbar^2}\chi_{kl}.$$

Функцию $\chi_{kl}$ будем считать нормированной условием

$$\int_0^\infty |\chi_{kl}|^2\, dr = 1.$$

Умножая первое уравнение на $\frac{\partial \chi_{kl}}{\partial E}$, а второе на $\chi_{kl}$, вычитая одно из другого и интегрируя по $dr$, получим

$$\chi'_{kl}\frac{\partial \chi_{kl}}{\partial E} - \chi_{kl}\left(\frac{\partial \chi_{kl}}{\partial E}\right)' = \frac{2m}{\hbar^2}\int_0^r \chi_{kl}^2\, dr. \tag{97,7}$$

Мы применим это соотношение при $E = -E_0$ и $r \to \infty$. Функции $a_l(k)$ и $b_l(k)$ разложим вблизи точки $k = k_0$ в ряд и переобозначим постоянную

$$a_l(k) = a_l(k_0) = A_l i^{-l}, \qquad b_l(k) = \beta_l(k - k_0). \tag{97,8}$$

Используя эти разложения и соотношения (97,7), (97,1), получаем

$$\beta_l = -\frac{i}{a_l} = -\frac{i^{l+1}}{A_l}. \tag{97,9}$$

Подставляя выражение (97,9) в (97,2), находим вычет $c_l$ в точке $k = k_0$:

$$c_l = iA_l^2(-1)^{l+1}. \tag{97,10}$$

Таким образом, мы связали величину вычета $c_l$ с амплитудой $A_l$ в асимптотическом выражении волновой функции $\chi_{kl}$, $\chi_{kl} = A_l e^{-|k_0| r}$ связанного состояния.

Исследование поведения фаз рассеяния $\delta_l(k)$, а следовательно, и функции $S_l(k) = e^{2i\delta_l(k)}$ и экстраполяция этих результатов в комплексную область дает возможность на основании (97,10) сделать определенные заключения и о волновой функции связанного состояния.

Аналитические свойства величин $S_l(k)$ позволяют получить важные соотношения, которым должна удовлетворять амплитуда рассеяния. Эти соотношения носят название дисперсионных соотношений. Наиболее простыми и вместе с тем наиболее существенными являются дисперсионные соотношения для амплитуды рассеяния на угол нуль, $f(0, k)$.

Дисперсионные соотношения устанавливают связь между действительной и мнимой частями амплитуды рассеяния $f(\vartheta, k)$

$$f(\vartheta, k) = \operatorname{Re} f(\vartheta, k) + i \operatorname{Im} f(\vartheta, k)$$

и основаны на использовании формулы Коши в теории аналитических функций.

Предположим, что $F(k)$ — некоторая функция, аналитическая в верхней полуплоскости комплексного переменного $k$, имеющая простые полюсы на верхней мнимой полуоси. Рассмотрим интеграл

$$\int_C \frac{F(k')\, dk'}{k' - k},$$

взятый по контуру, изображенному на рис. 27.

Данный интеграл определяется суммой вычетов подынтегральной функции. Эти вычеты берутся в точке $k' = k$ и в точках $k' = k_1, k_2, \ldots$, где расположены полюса функции $F(k)$. Если функция $F(k)$ достаточно быстро стремится к нулю при $|k| \to \infty$, то интеграл по верхней полуокружности равен нулю. Тогда имеем

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{F(k')}{k' - k} dk' = 2\pi i \left( F(k) + \sum_n \frac{\operatorname{Res} F(k_n)}{k_n - k} \right). \tag{97,11}$$

Рис. 27.

Здесь через $\operatorname{Res} F(k_n)$ обозначен вычет функции $F$ в точке $k' = k_n$. Пусть теперь мнимая часть $k$ стремится к нулю, так что $k$ стремится к точке $k_0$, расположенной на действительной оси.

В этом случае

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{F(k')\,dk'}{k'-k_0} = P\int_{-\infty}^{\infty} \frac{F(k')\,dk'}{k'-k_0} + i\pi F(k_0). \qquad (97,12)$$

Здесь $P$ означает, что интеграл понимается в смысле главного значения

$$P\int_{-\infty}^{\infty} \frac{F(k')\,dk'}{k'-k_0} = \lim_{\varepsilon\to 0}\left[\int_{-\infty}^{k_0-\varepsilon} \frac{F(k')\,dk'}{k'-k_0} + \int_{k_0+\varepsilon}^{\infty} \frac{F(k')\,dk'}{k'-k_0}\right],$$

а второй член в правой части (97,12) возник из-за интегрирования, по малой полуокружности около точки $k = k_0$.

Основываясь на результатах (97,11), (97,12), получим дисперсионное соотношение для амплитуды рассеяния на угол нуль $f(0, k)$. Амплитуда $f(0, k)$ связана с матричными элементами $S_l$ (95,24) соотношением (86,11)

$$f(0,\ k) = \frac{1}{2ik}\sum_l (2l+1)(S_l - 1). \qquad (97,13)$$

Из этого выражения следует, что полюсы функции $S_l(k)$ являются полюсами и функции $f(0, k)$, а других полюсов функция $f(0, k)$ не имеет. Точка $k = 0$ вообще не является полюсом, так как при $k \to 0$, $\delta \to 0$, $S_l \to 1$ (см. § 86). Таким образом, функция $f(0, k)$ аналитична в верхней полуплоскости комплексного переменного $k$ и имеет полюсы на верхней мнимой полуоси. Дисперсионные соотношения для этой функции легко получить, если подставить в соотношения (97,11), (97,12) функцию $F(k)$ в виде

$$F(k) = f(0,\ k) - f(0,\ \infty). \qquad (97,14)$$

Из амплитуды $f(0, k)$ вычитается ее значение при $k \to \infty$ для того, чтобы обратился в нуль интеграл по большой полуокружности (см. рис. 27). При $k \to \infty$ в уравнении Шредингера можно пренебречь членом с потенциалом $U(\boldsymbol{r})$. Решение такого уравнения имеет вид плоской волны. Подставляя такое решение в (83,10), получаем

$$f(0,\ \infty) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int U(\boldsymbol{r})\,dV. \qquad (97,15)$$

Выражение (97,15) представляет собой амплитуду рассеяния в борновском приближении (см. § 84), т. е. $f(0, \infty) = f_B$. Подставляя (97,14) в соотношения (97,11), (97,12) и учитывая, что интеграл с борновской амплитудой обращается в нуль,

получаем

$$f(0,\ k)=f_B+\frac{1}{i\pi}P\int_{-\infty}^{\infty}\frac{f(0,\ k')\,dk'}{k'-k}-2\sum_{n,\ l}\frac{\operatorname{Res} f(0,\ k_{nl})}{k_{nl}-k}. \qquad (97,16)$$

В этом соотношении $k$ считается действительным, а индекс нуль мы опустили. Точки $k=k_{nl}$ лежат на верхней мнимой полуоси и отвечают полюсам функций $S_l(k)$. Суммирование в (97,16) проводится по всем связанным состояниям. Выражение для вычета функции $S_l$ через амплитуду соответствующего связанного состояния дается формулой (97,10). Учитывая (97,13), имеем

$$\operatorname{Res} f(0,\ k_{nl})=\frac{1}{2k_{nl}}A_{nl}^2(-1)^{l+1}(2l+1). \qquad (97,17)$$

Соотношение (97,16) можно переписать в несколько ином виде, если учесть, что согласно (97,3) и (97,4) при действительном $k$ $S_l(-k)=S_l^*(k)$ и соответственно [см. (97,13)] $f(0,-k)=f^*(0,k)$. Поэтому интегрирование в (97,16) может быть проведено только по имеющим физический смысл положительным значениям $k$. Приравнивая в (97,16) слева и справа действительные части, окончательно имеем

$$\operatorname{Re} f(0,\ k)=f_B+\frac{2}{\pi}P\int_0^{\infty}\frac{\operatorname{Im} f(0,\ k')\,k'dk'}{k'^2-k^2}-\operatorname{Re}\sum_{n,\ l}\frac{A_{nl}^2(-1)^{l+1}(2l+1)}{k_{nl}(k_{nl}-k)}. \qquad (97,18)$$

Входящая в правую часть равенства мнимая часть амплитуды $\operatorname{Im} f(0,k)$ может быть выражена согласно оптической теореме [см. (91,11)] через физически наблюдаемую величину — полное сечение рассеяния $\sigma(k)$. Поэтому и действительная часть $\operatorname{Re} f(0,k)$ согласно (97,18) может быть выражена через физически наблюдаемые величины. Дисперсионные соотношения находят в настоящее время широкую область применения. В частности, с их помощью можно сразу устранить отмеченную в § 95 неоднозначность выбора фаз при известном законе рассеяния, т. е. при известном эффективном сечении. Подчеркнем, что дисперсионные соотношения основаны на таком общем свойстве матрицы рассеяния, как ее аналитичность, вытекающем из принципа причинности.

## § 98. Обращение времени и принцип детального равновесия

Рассмотрим свойства $S$-матрицы, связанные с симметрией уравнения Шредингера по отношению к обращению времени. Мы уже касались этого вопроса в § 6 и сейчас рассмотрим его более подробно.

Симметрия по отношению к обращению времени означает, что существует решение $\psi_{обр}(x, t)$ «обращенного» уравнения Шредингера, выражающееся через функцию $\psi(x, -t)$.

Если оператор $\hat{H}$ не зависит от времени явно, то

$$i\hbar \frac{\partial \psi^*(x, -t)}{\partial t} = \hat{H}^* \psi^*(x, -t). \qquad (98,1)$$

При $\hat{H}^* = \hat{H}$ уравнение (98,1) совпадает с исходным уравнением (27,7), а функция $\psi^*(x, -t)$ описывает процесс, обращенный во времени [см. (6.9)]. В более общем случае (например, заряженная частица в магнитном поле) мы должны положить

$$\psi_{обр}(x, t) = \hat{V}\psi^*(x, -t), \qquad (98,2)$$

где $\hat{V}$ — некоторый оператор. Действуя на уравнение (98,1) слева оператором $\hat{V}$, получим уравнение для функции $\psi_{обр}$

$$i\hbar \frac{\partial \psi_{обр}(x, t)}{\partial t} = \hat{V}\hat{H}^*\hat{V}^{-1}\psi_{обр}(x, t). \qquad (98,3)$$

Это уравнение совпадает с исходным уравнением Шредингера (27,7) при условии

$$\hat{V}\hat{H}^* = \hat{H}\hat{V}. \qquad (98,4)$$

Из эрмитовости оператора $\hat{H}$ следует, что оператор $\hat{V}$ должен быть унитарным, т. е. $\hat{V}^{-1} = \hat{V}^+$. Закону преобразования волновых функций (98,2) отвечает определенный закон преобразования и произвольных операторов $\hat{F}$. Этот закон может быть найден обычными методами (см. § 46, 48, 49).

Некоторая специфика в данном случае возникает лишь в связи с тем, что оператор $\hat{V}$ действует не на функцию $\psi$, а на функцию $\psi^*$. Оператор $\hat{F}_{обр}$ (обращенный во времени) мы найдем, исходя из требования, что матричный элемент оператора $\hat{F}$, взятый по функциям $\psi_{обр}$, должен совпадать с матричным элементом оператора $\hat{F}_{обр}$, взятым по функциям $\psi(x, -t)$:

$$\langle \psi_{обр} | \hat{F} | \psi_{обр} \rangle = \langle \psi(-t) | \hat{F}_{обр} | \psi(-t) \rangle. \qquad (98,5)$$

Используя соотношение (98,2), получаем

$$\langle \psi_{обр} | \hat{F} | \psi_{обр} \rangle = \langle \hat{V}\psi^*(-t) | \hat{F} | \hat{V}\psi^*(-t) \rangle = \langle \psi^*(-t) | \hat{V}^+\hat{F}\hat{V} | \psi^*(-t) \rangle.$$

Отсюда следует [см. (17,3)]

$$\tilde{\hat{F}}_{обр} = \hat{V}^+\hat{F}\hat{V}, \qquad (98,6)$$

где через $\tilde{\hat{F}}_{обр}$ обозначен оператор, транспонированный к оператору $\hat{F}_{обр}$. Как легко видеть из (98,4) и (98,6), оператор $\hat{H}$

инвариантен по отношению к обращению времени, т. е. $\hat{H}_{обр}=\hat{H}$. При этом мы использовали условие эрмитовости гамильтониана $\tilde{\hat{H}}=\hat{H}^*$. Соотношение (98,6) может служить основой для нахождения оператора $\hat{V}$. Действительно, естественно потребовать, чтобы квантовые операторы при обращении времени преобразовывались бы так же, как и соответствующие классические величины. Такие величины, как энергия, координата, напряженность электрического поля и т. д. инвариантны по отношению к обращению времени. Инвариантны должны быть и соответствующие операторы. Скорость, импульс, момент количества движения, напряженность магнитного поля и т. д. изменяют знак при обращении времени. Таким же свойством должны обладать и соответствующие операторы. Например, должны выполняться соотношения

$$\hat{\boldsymbol{r}}_{обр}=\hat{\boldsymbol{r}}, \quad \hat{\boldsymbol{p}}_{обр}=-\hat{\boldsymbol{p}}, \quad \hat{\boldsymbol{L}}_{обр}=-\hat{\boldsymbol{L}}. \tag{98,7}$$

Спин преобразуется как момент количества движения, т. е. должно выполняться соотношение

$$\hat{\boldsymbol{s}}_{обр}=-\hat{\boldsymbol{s}}. \tag{98,8}$$

Рассмотрим, например, частицу со спином 1/2. Исходя из соотношений (98,8), легко найти оператор $\hat{V}_s$, воздействующий на спиновые переменные при обращении времени. Используя выражения (98,6) и учитывая вид операторов спина (60,15), (60,16), имеем

$$\left.\begin{aligned} \hat{V}_s^+\hat{s}_x\hat{V}_s &= -\hat{s}_x,\\ \hat{V}_s^+\hat{s}_y\hat{V}_s &= \hat{s}_y,\\ \hat{V}_s^+\hat{s}_z\hat{V}_s &= -\hat{s}_z. \end{aligned}\right\} \tag{98,9}$$

Из этих соотношений с помощью (60,12) легко находим

$$\hat{V}_s=i\sigma_y. \tag{98.10}$$

(Мы выбрали фазовый множитель так, чтобы оператор $\hat{V}_s$ был действителен.) При движении частицы в магнитном поле оператор $\hat{V}$ должен включать в себя оператор, изменяющий направление магнитного поля (или векторного потенциала $\boldsymbol{A}$) на обратное. С учетом этого обстоятельства соотношение (98,4) имеет вид

$$\sigma_y\hat{H}^*(-\boldsymbol{A})=\hat{H}(\boldsymbol{A})\sigma_y. \tag{98,11}$$

Легко проверить, что гамильтониан $\hat{H}$ [см. (63,3)] удовлетворяет этому соотношению. Инвариантность уравнения Шредингера по отношению к обращению времени означает, что всегда

можно найти оператор $\hat{V}$, удовлетворяющий условию (98,4) [см. подробнее[1])]. Однако открытые в 1964 г. аномалии при распаде $K$-мезонов показывают, что, по-видимому, при определенных условиях принцип обратимости времени может нарушаться.

Из инвариантности гамильтониана $\hat{H}$ по отношению к замене $t \to -t$ следует инвариантность $S$-матрицы, т. е. [см. (98,6)] выполняется соотношением

$$\hat{V}^+\hat{S}\hat{V} = \tilde{\tilde{S}}. \tag{98.12}$$

Справедливость этого соотношения легко проверяется, с учетом (98,4), для оператора $\hat{V}(t, t_0)$ [см. (96,5)]. Так как оператор $\hat{S}$ определяется как предел оператора $\hat{V}(t, t_0)$ [см. (96,11)], то он также удовлетворяет соотношению (98,12).

Основываясь на соотношении (98,12), не представляет труда установить связь непосредственно между матричными элементами $S$-матрицы для прямых и обратных реакций. Обозначим через $\psi_a$ и $\psi_b$ волновые функции начального и конечного состояния системы. Тогда, учитывая (17,3), (98,2) и (98,12), имеем

$$\langle\psi_b | \hat{S} | \psi_a\rangle = \langle\psi_a^* | \tilde{\tilde{S}} | \psi_b^*\rangle = \langle\psi_a^* | \hat{V}^+\hat{S}\hat{V} | \psi_b^*\rangle =$$
$$= \langle\hat{V}\psi_a^* | \hat{S} | \hat{V}\psi_b^*\rangle = \langle\psi_{a^*} | \hat{S} | \psi_{b^*}\rangle, \tag{98,13}$$

где через $\psi_{a^*}$ и $\psi_{b^*}$ обозначены «обращенные» волновые функции состояний $a$ и $b$. Таким образом, выполняется равенство

$$S_{ba} = S_{a^*b^*}. \tag{98,14}$$

Соотношение (98,14) устанавливает связь между матричными элементами $S$-матрицы прямого и «обращенного» процесса. Состояния $\psi_{a^*}$, $\psi_{b^*}$ отличаются от состояний $\psi_a$, $\psi_b$ знаком таких величин, как скорости, импульсы, проекции момента количества движения, спина и т. д. Соотношение (98,14), или эквивалентное ему соотношение (98,13) носит название теоремы взаимности. На основании этой теоремы может быть установлена связь между сечениями прямых и обратных реакций (принцип детального равновесия).

Рассмотрим реакцию

$$a + A \rightleftarrows b + B.$$

Обозначим через $j_a$, $m_a$, $j_A$, $m_A$, $j_b$, $m_b$, $j_B$, $m_B$ полные моменты и их проекции частиц, участвующих в реакции. Сечения прямой и обратной реакции, выраженные через матричные

---

[1]) А. М. Балдин, В. И. Гольданский, И. Л. Розенталь, Кинетика ядерных реакций, Физматгиз, 1959.

элементы $S$-матрицы, согласно (95,14) имеют вид

$$\frac{d\sigma_{ba}}{d\Omega_b}=\frac{4\pi^2}{k_a^2}\left|\langle j_b,\ m_b,\ j_B,\ m_B;\ -\boldsymbol{n}_b\,|\hat{S}|\,j_a,\ m_a,\ j_A,\ m_A;\ \boldsymbol{n}_a\rangle\right|^2, \quad (98,15)$$

$$\frac{d\sigma_{ab}}{d\Omega_a}=\frac{4\pi^2}{k_b^2}\left|\langle j_a,\ m_a,\ j_A,\ m_A;\ -\boldsymbol{n}_a\,|\hat{S}|\,j_b,\ m_b,\ j_B,\ m_B;\ \boldsymbol{n}_b\rangle\right|^2. \quad (98,16)$$

Так как вектор импульса относительного движения частиц в конечном состоянии направлен от центра тяжести, ему приписан знак минус.

Непосредственно написать связь между этими сечениями нельзя, так как теорема взаимности связывает сечение прямого процесса и «обращенного», отличающегося от (98,16) изменением знаков проекций моментов $m_a$, $m_A$, $m_b$, $m_B$ на обратные. Можно, однако, написать связь между усредненными сечениями, т. е. сечениями, просуммированными по проекциям моментов конечных состояний и усредненными по проекциям моментов начальных состояний. Такие сечения уже не зависят от проекций моментов и для них теорема взаимности (98,14) дает

$$\frac{1}{k_b^2}(2j_a+1)(2j_A+1)\frac{\overline{d\sigma_{ba}}}{d\Omega_b}=\frac{1}{k_a^2}(2j_B+1)(2j_b+1)\frac{\overline{d\sigma_{ab}}}{d\Omega_a}, \quad (98,17)$$

где

$$\frac{\overline{d\sigma_{ba}}}{d\Omega_b}=\frac{1}{(2j_a+1)(2j_A+1)}\sum_{\substack{m_a,\,m_A\\ m_b,\,m_B}}\frac{d\sigma_{ba}}{d\Omega_b} \quad (98,18)$$

и

$$\frac{\overline{d\sigma_{ab}}}{d\Omega_a}=\frac{1}{(2j_b+1)(2j_B+1)}\sum_{\substack{m_a,\,m_A\\ m_b,\,m_B}}\frac{d\sigma_{ab}}{d\Omega_a}. \quad (98,19)$$

Соотношение, аналогичное (98,17), можно написать и для полных сечений

$$k_a^2(2j_a+1)(2j_A+1)\bar{\sigma}_{ba}=k_b^2(2j_b+1)(2j_B+1)\bar{\sigma}_{ab}. \quad (98,20)$$

Отметим, что в рамках применимости теории возмущений можно установить связь и между неусредненными сечениями прямых и обратных реакций

$$\frac{1}{k_b^2}\frac{d\sigma_{ba}}{d\Omega_b}=\frac{1}{k_a^2}\frac{d\sigma_{ab}}{d\Omega_a}. \quad (98,21)$$

Действительно, в этом случае вероятность перехода, а следовательно, и эффективное сечение процесса определяются квадратом модуля матричного элемента гамильтониана возмущения $H'_{ba}$, для которого в силу эрмитовости выполняется соотношение $|H'_{ba}|^2=|H'_{ab}|^2$. Из этого равенства следует соотношение (98,21).

ГЛАВА XII

# МЕТОД ВТОРИЧНОГО КВАНТОВАНИЯ И ТЕОРИЯ ИЗЛУЧЕНИЯ

## § 99. Вторичное квантование для систем бозе- и ферми-частиц [1])

Одним из важных формальных расчетных методов, часто применяющихся в квантовой механике системы многих частиц, является так называемый метод вторичного квантования.

В методе вторичного квантования совершается переход от координатного представления волновой функции к новым переменным. В качестве новых переменных выбираются числа частиц, находящихся в данном квантовом состоянии. Таким образом, характеристика системы частиц заключается теперь не в задании волновой функции $\psi(\xi_1, \xi_2, \ldots, \xi_N, t)$, а в задании новой функции $c(n_1, n_2, \ldots, t)$, где $n_1, n_2, \ldots$ — числа частиц в 1-м, 2-м и т. д. состояниях. Величины $n_1, n_2, \ldots$ мы будем именовать числами заполнения.

Величина

$$|c(n_1, n_2, \ldots, n_k, \ldots, t)|^2 \tag{99,1}$$

дает вероятность того, что в момент времени $t$ в первом состоянии находится $n_1$ частиц, во втором состоянии — $n_2$ частиц и т. д. Метод вторичного квантования оказывается весьма удобным для таких систем, в которых изменяется число частиц в данном состоянии, а также происходит рождение и исчезновение частиц данного сорта (как например, при излучении и поглощении фотонов, при $\beta$-распаде ядер и т. д.). Переход от обычного описания ко вторичному квантованию является одним из примеров преобразования от одного представления к другому.

Рассмотрим формально систему невзаимодействующих тождественных частиц. Будем сперва предполагать, что частицы подчиняются статистике Бозе.

Обозначим через $\psi_1(\xi), \psi_2(\xi), \ldots, \psi_k(\xi), \ldots$ совокупность ортогональных и нормированных волновых функций отдельной

---

[1]) В изложении этого параграфа мы следуем книге Л. Д. Ландау и Е. М. Лифшица, Квантовая механика, Физматгиз, 1963.

частицы, образующих некоторую произвольным образом выбранную полную систему функций. Индекс $k$ обозначает номер состояния, характеризуемого выбранной совокупностью четырех квантовых чисел. Перейдем к представлению, в котором за независимые переменные выбираются не координаты частиц $\xi_i$, а числа заполнения $n_k$.

В новом представлении базисными функциями (см. § 65) служат симметризованные и нормированные произведения волновых функций отдельных частиц $\psi_k(\xi_i)$. Формула (65,5) для общего случая, когда в состоянии $\psi_1$ находится $n_1$ частиц, в состоянии $\psi_2$ — $n_2$ частиц и т. д., приобретает вид

$$\psi_{n_1, n_2, n_3, \ldots}(\xi_1, \xi_2, \ldots, \xi_N) = \\ = \left(\frac{n_1!\, n_2!\, n_3! \ldots}{N!}\right)^{1/2} \sum \psi_{k_1}(\xi_1)\, \psi_{k_2}(\xi_2) \ldots \psi_{k_N}(\xi_N). \quad (99,2)$$

Суммирование ведется только по всем перестановкам разных индексов $k_1$, $k_2$, ...

Введем операторы $\hat{a}_k^+$ и $\hat{a}_k$, действующие на новые переменные — числа заполнения в состоянии $k$. Определим эти операторы формулами

$$\hat{a}_k \psi_{n_1, \ldots, n_k, \ldots} = \sqrt{n_k}\, \psi_{n_1, \ldots, n_k - 1, \ldots}, \quad (99,3)$$

$$\hat{a}_k^+ \psi_{n_1, \ldots, n_k, \ldots} = \sqrt{n_k + 1}\, \psi_{n_1, \ldots, n_k + 1, \ldots}. \quad (99,4)$$

Оператор $\hat{a}_k$ уменьшает число частиц в состоянии $k$ на единицу, т. е. заменяет $n_k$ на $n_k - 1$. Оператор $\hat{a}_k^+$ увеличивает это число на единицу, т. е. заменяет $n_k - 1$ на $n_k$. Очевидно, что последовательное применение операторов $\hat{a}_k$ и $\hat{a}_k^+$ не изменяет числа частиц в $k$-м состоянии, т. е.

$$\hat{a}_k^+ \hat{a}_k \psi_{n_1, \ldots, n_k, \ldots} = n_k \psi_{n_1, \ldots, n_k, \ldots}. \quad (99,5)$$

Матричные элементы операторов $\hat{a}_k$ и $\hat{a}_k^+$ имеют вид

$$(n_1, n_2, \ldots, n_k - 1, \ldots | \hat{a}_k | n_1, n_2, \ldots, n_k, \ldots) = \\ = (a_k)_{n_k - 1, n_k} = \sqrt{n_k}, \quad (99,6)$$

$$(n_1, n_2, \ldots, n_k + 1, \ldots | \hat{a}_k^+ | n_1, n_2, \ldots, n_k, \ldots) = \\ = (a_k^+)_{n_k + 1, n_k} = \sqrt{n_k + 1}, \quad (99,7)$$

$$(a_k^+ a_k)_{n_k', n_k} = n_k \delta_{n_k', n_k}. \quad (99,8)$$

В соответствии с их смыслом, операторы $\hat{a}_k$ и $\hat{a}_k^+$ называются соответственно операторами уничтожения и рождения частицы в $k$-м состоянии. Оператор $\hat{a}_k^+\hat{a}_k$ называют оператором числа частиц $n_k$, находящихся в состоянии $k$.

С операторами, сходными с операторами $\hat{a}_k^+$ и $\hat{a}_k$, мы уже встречались в § 50 при рассмотрении задачи об осцилляторе. Нетрудно видеть, что операторы $\hat{a}_k$ и $\hat{a}_k^+$ удовлетворяют перестановочным соотношениям

$$\left.\begin{aligned} \hat{a}_k\hat{a}_l^+ - \hat{a}_l^+\hat{a}_k &= \delta_{kl}, \\ \hat{a}_k\hat{a}_l - \hat{a}_l\hat{a}_k &= 0, \\ \hat{a}_k^+\hat{a}_l^+ - \hat{a}_l^+\hat{a}_k^+ &= 0. \end{aligned}\right\} \qquad (99,9)$$

Покажем, как можно выразить обычные операторы, действующие на волновую функцию в координатном представлении, через операторы рождения и уничтожения частиц, т. е. в представлении вторичного квантования.

Рассмотрим оператор $\hat{L}(\xi_i)$, действующий на координаты одной $i$-й частицы. Под координатами подразумевается также и спиновая координата. Поскольку все частицы равноправны, введем оператор $\hat{L}_1 = \sum\limits_{i=1}^{N} \hat{L}(\xi_i)$. Найдем выражение для него в представлении вторичного квантования. Матричные элементы $\hat{L}_1$ получим с помощью базисных функций (99,2).

Имеем по определению

$$(n_1', \ldots, n_k', \ldots |\hat{L}_1| n_1, \ldots, n_k, \ldots) = \\ = \left(n_1', \ldots, n_k', \ldots \left| \sum_{i=1}^{N} \hat{L}(\xi_i) \right| n_1, \ldots, n_k, \ldots \right). \qquad (99,10)$$

Рассмотрим один член суммы по частицам

$$(n_1', \ldots, n_k', \ldots |\hat{L}(\xi_i)| n_1, \ldots, n_k, \ldots) = \\ = \int \psi^*_{n_1', \ldots, n_k', \ldots} \hat{L}(\xi_i) \psi_{n_1, \ldots, n_k, \ldots} d\xi_1 \ldots d\xi_N. \qquad (99,11)$$

(По спиновым переменным имеется в виду суммирование.) Оператор $\hat{L}(\xi_i)$ действует только на переменные $i$-й частицы. Поэтому можно написать

$$\hat{L}(\xi_i)\psi_{n_1, \ldots, n_k, \ldots} = \\ = \left(\frac{n_1! \ldots n_k! \ldots}{N!}\right)^{1/2} \sum \psi_{k_1}(\xi_1) \ldots \psi_{k_N}(\xi_N)\hat{L}(\xi_i)\psi_{k_i}(\xi_i). \qquad (99,12)$$

Умножая (99,12) на функцию $\overset{*}{\psi}_{n'_1 \ldots}$ и интегрируя, мы замечаем прежде всего, что интегралы по всем переменным, кроме $\xi_i$, содержат только произведения волновых функций.

В силу ортогональности последних обратятся в нуль все интегралы, в которые входят множители вида $\psi_1^*(\xi_1)\psi_2(\xi_1)$, т. е. содержащие произведения волновых функций частиц (кроме $i$-й), относящихся к различным состояниям.

В двойной сумме по перестановкам (99,11) отличны от нуля лишь те слагаемые, которые содержат произведения волновых функций частиц (кроме $i$-й), относящихся к одинаковым состояниям. Интеграл по переменным $\xi_i$ имеет вид

$$(\hat{L}(\xi_i))_{lk} = \int \psi_l^*(\xi_i)\hat{L}(\xi_i)\psi_k(\xi_i)\,d\xi_i.$$

Это означает, что при $l \neq k$, имеет место переход частицы из $k$-го состояния в $l$-е. Следовательно, число частиц в $k$-м состоянии уменьшается на единицу, а в $l$-м — увеличивается на единицу. Соответствующий матричный элемент обозначим через

$$(n_k - 1,\ n_l|\,\hat{L}(\xi_i)\,|n_k,\ n_l - 1) \tag{99,13}$$

(по остальным числам заполнения оператор диагонален и мы их не выписываем). Входящие в матричный элемент функции имеют вид

$$\psi^*_{n_1,\ \ldots,\ n_k-1,\ \ldots} = \left(\frac{n_1!\ldots(n_k-1)!\ldots n_l!\ldots}{N!}\right)^{1/2} \sum \psi^*_{k_1}(\xi_1)\ldots\psi^*_{k_N}(\xi_N),$$

$$\psi_{n_1,\ \ldots,\ n_l-1,\ \ldots} = \left(\frac{n_1!\ldots n_k!\ldots(n_l-1)!\ldots}{N!}\right)^{1/2} \sum \psi_{k_1}(\xi_1)\ldots\psi_{k_N}(\xi_N).$$

Интегрирование по координатам всех частиц в силу ортогональности волновых функций дает (учитывая перестановки $N-1$ частицы, кроме $i$-й)

$$(n_k - 1,\ n_l|\,\hat{L}(\xi_i)\,|n_k,\ n_l - 1) = \left(\frac{n_1!\ldots(n_k-1)!\ldots n_l!\ldots}{N!}\right)^{1/2} \times$$
$$\times \left(\frac{n_1!\ldots n_k!\ldots(n_l-1)!\ldots}{N!}\right)^{1/2} \frac{(N-1)!}{n_1!\ldots(n_k-1)!\ldots(n_l-1)!\ldots}(\hat{L}(\xi_i))_{lk} =$$
$$= \frac{\sqrt{n_k n_l}}{N}(\hat{L}(\xi_i))_{lk}.$$

Поскольку операторы $\hat{L}(\xi_1)$, $\hat{L}(\xi_2)$, ... отличаются друг от друга только номером частиц, на координаты которых они действуют, все матричные элементы, отличающиеся номером частицы, равны между собой. Поэтому для матричного элемента (99,10)

оператора $\hat{L}_1$ можно написать окончательно:

$$(n_k-1,\ n_l|\hat{L}_1|n_k,\ n_l-1)=\left(n_k-1,\ n_l\left|\sum_{i=1}^{N}\hat{L}(\xi_i)\right|n_k,\ n_l-1\right)=$$
$$=N(n_k-1,\ n_l|\hat{L}(\xi_i)|n_k,\ n_l-1)=\sqrt{n_k n_l}\,(L(\xi))_{lk}. \qquad (99,14)$$

В том случае, когда рассматривается диагональный матричный элемент, т. е. когда распределение числа частиц по состояниям не изменяется, мы имеем аналогичным образом:

$$(n_1,\ n_2,\ \ldots|\hat{L}_1|n_1,\ n_2,\ \ldots)=\sum_k n_k(L(\xi))_{kk}. \qquad (99,15)$$

Введем теперь в формулы (99,14) и (99,15) операторы $\hat{a}^+$ и $\hat{a}$. Тогда оператор $\hat{L}_1$ можно записать в виде

$$\hat{L}_1=\sum_{k,\,l}(L(\xi))_{lk}\,\hat{a}_l^+\hat{a}_k. \qquad (99,16)$$

Действительно, матричные элементы последнего оператора в силу (99,6), (99,7) и (99,8) совпадают с матричными элементами (99,14) и (99,15).

Аналогичный результат можно тем же способом получить для операторов, действующих на координаты двух частиц $\xi_i$ и $\xi_j$.

Оператор

$$\hat{L}_2=\sum_{i,\,j=1}^{N}\hat{L}(\xi_i,\ \xi_j)$$

в представлении вторичного квантования выражается формулой

$$\hat{L}_2=\sum_{k,\,p,\,l,\,m}(lm|\hat{L}(\xi,\ \xi')|kp)\,\hat{a}_l^+\hat{a}_m^+\hat{a}_k\hat{a}_p, \qquad (99,17)$$

где матричные элементы равны

$$(l,\ m|\hat{L}(\xi,\ \xi')|k,\ p)=\int\psi_l^*(\xi)\psi_m^*(\xi')\hat{L}(\xi,\xi')\,\psi_k(\xi)\,\psi_p(\xi')\,d\xi\,d\xi'. \qquad (99,18)$$

С помощью общих формул (99,16) и (99,17) можно записать оператор Гамильтона системы частиц в представлении вторичного квантования. В случае системы невзаимодействующих частиц, находящихся в заданном внешнем поле, имеем

$$\hat{H}=\sum_{i=1}^{N}\hat{H}_i=\sum_{i=1}^{N}(\hat{T}_i+U(\xi_i))=\sum_{i=1}^{N}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_i+U(\xi_i)\right), \qquad (99,19)$$

где $U(\xi_i)$ — потенциальная энергия $i$-й частицы во внешнем поле и $\hat{T}_i$ — оператор ее кинетической энергии. Оператор (99,19) является, очевидно, частным случаем оператора $\hat{L}_1$. Соответственно этому, можем сразу написать оператор (99,19)

в представлении вторичного квантования

$$\hat{H} = \sum_{k, l} (\hat{H}_i)_{lk} \hat{a}_l^+ \hat{a}_k. \tag{99,20}$$

Выбирая за $\psi_k$ собственные функции оператора Гамильтона $\hat{H}_i$ отдельной частицы, имеем:

$$(\hat{H}_i)_{lk} = \int \psi_l^*(\xi) \hat{H}_i(\xi) \psi_k(\xi) d\xi = E_k \delta_{lk},$$

где $E_k$ — энергии частицы в $k$-м состоянии.

Поэтому окончательно

$$\hat{H} = \sum_k E_k \hat{a}_k^+ \hat{a}_k. \tag{99,21}$$

Энергия системы частиц в силу (99,8) равна

$$E = \sum E_k n_k. \tag{99,22}$$

Если за $\psi_k$ выбрать собственные функции оператора $\hat{T}_i$, отвечающие собственным значениям $\varepsilon_k$, то (99,20) перепишется в виде

$$\hat{H} = \sum_k \varepsilon_k \hat{a}_k^+ \hat{a}_k + \sum_{k, l} \hat{a}_l^+ \hat{a}_k \int \psi_l^* U(\xi) \psi_k d\xi. \tag{99,23}$$

В случае системы частиц, между которыми существует попарное взаимодействие, оператор энергии взаимодействия имеет вид

$$\frac{1}{2} \sum_{i \neq j} W(\xi_i, \xi_j).$$

Напишем, используя (99,17), оператор Гамильтона в представлении вторичного квантования

$$\hat{H} = \sum_{k, l} (\hat{H}_i)_{lk} \hat{a}_l^+ \hat{a}_k + \frac{1}{2} \sum_{k, p, l, m} (lm | W | kp) \hat{a}_l^+ \hat{a}_m^+ \hat{a}_k \hat{a}_p, \tag{99,24}$$

или, беря за функции $\psi_k$ собственные функции оператора $\hat{H}_i$,

$$\hat{H} = \sum_k E_k \hat{a}_k^+ \hat{a}_k + \frac{1}{2} \sum_{k, p, l, m} (lm | W | kp) \hat{a}_l^+ \hat{a}_m^+ \hat{a}_k \hat{a}_p. \tag{99,25}$$

Заметим, что попарное взаимодействие (последний член в формуле (99,24)) допускает наглядную интерпретацию. Взаимодействие можно трактовать как столкновение двух частиц, находящихся в $p$-м и $k$-м состояниях. После взаимодействия они переходят в $l$-е и $m$-е состояния.

Полезно заметить, что формула (99,20) может быть получена с помощью следующего формального приема: заменим в выражении для средней энергии (65,9) волновую функцию на

оператор в пространстве чисел заполнения, определяемый как

$$\psi(\xi) \to \hat{\psi}(\xi) = \sum_k \hat{a}_k \psi_k(\xi) \tag{99,26}$$

и соответственно

$$\psi^*(\xi) \to \psi^+(\xi) = \sum_l \hat{a}_l^+ \psi_l^*(\xi). \tag{99,26'}$$

Тогда в правой части (65,9) имеем

$$\int \psi^*(\xi) \hat{H}_i \psi(\xi)\, d\xi \to \sum_{k,\, l} \int \hat{a}_l^+ \psi_l^*(\xi) \hat{H}_i \hat{a}_k \psi_k(\xi)\, d\xi = \sum_{k,\, l} \hat{a}_l^+ \hat{a}_k (\hat{H}_i)_{lk}. \tag{99,27}$$

Сравнивая (99,27) с (99,20), мы видим, что при замене обычной волновой функции на оператор, правая часть (65,9) совпадает с (99,20). Это означает, что при этом можно формально заменить $\overline{H}$ на оператор $\hat{H}$ в представлении вторичного квантования.

С заменой волновой функции $\psi$ оператором $\hat{\psi}$ связано и название метода вторичного квантования. При вторичном квантовании не только все механические величины заменяются квантовыми операторами (обычное квантование), но и квантуется, т. е. заменяется на оператор сама волновая функция. Хотя вторичное квантование является формальным приемом, оно оказывается весьма полезным в целом ряде случаев.

Аналогичным образом легко получить и гамильтониан системы попарно взаимодействующих частиц. Для этого в формуле (65,8) снова заменим функции $\psi$ и $\psi^*$ на операторы (99,26). При этом, в соответствии со сказанным выше, заменяем $\overline{H} \to \hat{H}$, где $\hat{H}$ — оператор Гамильтона в представлении вторичного квантования.

После замены получаем формулу (99,24).

---

Все полученные результаты относились к бозе-частицам. Можно показать[1]), что формулы (99,20) и (99,24) остаются справедливыми и для системы фермионов. Однако операторы $\hat{a}_k$ и $\hat{a}_k^+$ при этом уже не могут удовлетворять соотношениям (99,9). Действительно, для операторов $\hat{a}_k$ и $\hat{a}_k^+$, определенных формулами (99,9), собственные значения произведения $\hat{a}_k^+ \hat{a}_k$ равны произвольным положительным целым числам $n_k$. Для системы фермионов числа заполнения могут равняться лишь нулю и единице в соответствии с принципом Паули. Операторы $\hat{a}_k$

[1]) См. Л. Д. Ландау и Е. М. Лифшиц, Квантовая механика, Физматгиз, 1963, стр. 273.

и $\hat{a}_k^+$ должны теперь быть определены так, чтобы собственные значения оператора $\hat{a}_k^+\hat{a}_k$ равнялись нулю либо единице, т. е.

$$\left(\hat{a}_k^+\hat{a}_k\right)_{n_k n_k} = n_k = \begin{cases} 0 \\ 1. \end{cases} \tag{99,28}$$

Покажем, что условия (99,28) выполняются, если операторы $\hat{a}_k$ и $\hat{a}_k^+$ удовлетворяют следующим правилам антикоммутации:

$$\hat{a}_k\hat{a}_l^+ + \hat{a}_l^+\hat{a}_k = \delta_{kl}, \tag{99,29}$$

$$\hat{a}_k\hat{a}_l + \hat{a}_l\hat{a}_k = \hat{a}_k^+\hat{a}_l^+ + \hat{a}_l^+\hat{a}_k^+ = 0. \tag{99,30}$$

Для этого убедимся, что

$$(\hat{a}_k^+\hat{a}_k)^2 = \hat{a}_k^+\hat{a}_k. \tag{99,31}$$

Действительно, раскрываем левую часть и, пользуясь (99,29), получаем:

$$(\hat{a}_k^+\hat{a}_k)^2 = \hat{a}_k^+\hat{a}_k\hat{a}_k^+\hat{a}_k = \hat{a}_k^+\hat{a}_k\left(1 - \hat{a}_k\hat{a}_k^+\right) = \hat{a}_k^+\hat{a}_k - \hat{a}_k^+\hat{a}_k\hat{a}_k\hat{a}_k^+ = \hat{a}_k^+\hat{a}_k,$$

так как $\hat{a}_k^2 = 0$, что следует из (99,30).

Взяв диагональные матричные элементы от соотношения (99,31), находим:

$$n_k^2 = n_k.$$

Это равенство может выполняться лишь при $n_k = 0$ и $n_k = 1$. Основываясь на соотношениях (99,30), можно найти явный вид матриц $\hat{a}_k$. Поскольку числа $n_k$ принимают только два значения 0 и 1, то операторы $\hat{a}_k$ и $\hat{a}_k^+$ по этим переменным являются двухрядными матрицами. Приведем соответствующие матричные элементы без вывода. Они равны

$$\left(a_k\right)_{01} = \left(a_k^+\right)_{10} = \prod_{l=1}^{k-1} (1 - 2n_l). \tag{99,32}$$

Все остальные матричные элементы равны нулю. В результате перемножения величин $(1 - 2n_l)$, где $l = 1, 2, \ldots, k-1$, получается либо $(+1)$ либо $(-1)$ в зависимости от значения чисел заполнения состояний, предшествующих данному.

Ясно поэтому, что нумерация состояний $1, 2, \ldots, k$, будучи первоначально выбранной, не должна изменяться.

Уравнение Шредингера в представлении чисел заполнения, когда гамильтониан дается формулой (99,24), содержит в себе закон сохранения полного числа частиц (см. § 7). Однако введение операторов $\hat{a}_k^+$ и $\hat{a}_k$, описывающих поглощение и рождение частиц, позволяет при соответствующем обобщении исследовать и процессы, в которых число частиц данного сорта не сохраняется.

## § 100. Квантовая механика фотона

Опытное установление квантовой, или, как часто говорят, корпускулярной природы света послужило толчком к созданию квантовой теории в целом.

С другой стороны, построение последовательной квантовой теории электромагнитного поля явилось одним из наиболее выдающихся успехов квантовой теории.

Кванты света или фотоны являются элементарными частицами, отличительной особенностью которых служит то, что их масса покоя равна нулю. Поэтому они всегда движутся со скоростью $c$ в пустоте. Это обстоятельство приводит к некоторым важным особенностям в методе описания их поведения. Именно, связь между энергией и импульсом фотона дается общей формулой

$$\varepsilon = cp = \hbar ck. \tag{100,1}$$

Если заменить импульс фотона оператором, то оператор энергии в импульсном представлении имеет вид

$$\hat{H} = c\hat{p} = \hbar c\hat{k}. \tag{100,2}$$

Соответственно можно написать уравнение Шредингера в импульсном представлении

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H}\psi_p, \tag{100,3}$$

где $\psi_p$ — волновая функция фотона в импульсном представлении.

Оператор $\hat{H}$ связан с энергией фотона общей формулой

$$\varepsilon = \int \psi_p^* \hat{H} \psi_p \, d\boldsymbol{p} = \hbar c \int \psi_p^* \hat{k} \psi_p \, d\boldsymbol{p}. \tag{100,4}$$

С другой стороны, можно считать, что фотону адекватно электромагнитное поле, существующее во всем пространстве. Его энергия

$$\varepsilon = \int \frac{\boldsymbol{E}^2 + \boldsymbol{H}^2}{8\pi} \, dV = \frac{1}{4\pi} \int \boldsymbol{E}^2 \, dV. \tag{100,5}$$

Естественно отождествить энергию фотона с энергией электромагнитного поля. Оба вектора поля удовлетворяют уравнениям Максвелла, которые приводятся к виду

$$\Delta \boldsymbol{E} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \boldsymbol{E}}{\partial t^2} = 0,$$

и аналогично для вектора $\boldsymbol{H}$.

Разлагая $\boldsymbol{E}$ в интеграл Фурье

$$\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r}, t) = \int \boldsymbol{E}(\boldsymbol{k}, t) e^{i\boldsymbol{kr}} d\boldsymbol{k},$$

имеем

$$\frac{\partial^2 \boldsymbol{E}(\boldsymbol{k}, t)}{\partial t^2} + k^2 \boldsymbol{E}(\boldsymbol{k}, t) = 0,$$

или

$$\left[\frac{\partial \boldsymbol{E}(\boldsymbol{k}, t)}{\partial t} - ik\boldsymbol{E}(\boldsymbol{k}, t)\right]\left[\frac{\partial \boldsymbol{E}(\boldsymbol{k}, t)}{\partial t} + ik\boldsymbol{E}(\boldsymbol{k}, t)\right] = 0. \qquad (100,6)$$

В силу вещественности поля должно выполняться условие

$$\boldsymbol{E}(\boldsymbol{k}) = \boldsymbol{E}(-\boldsymbol{k}). \qquad (100,7)$$

Введем вместо компоненты Фурье $\boldsymbol{E}(\boldsymbol{k}, t)$ новую функцию $\boldsymbol{f}(\boldsymbol{k}, t)$, определенную соотношениями

$$\left.\begin{aligned} \boldsymbol{E}(\boldsymbol{k}, t) &= N(k)[\boldsymbol{f}(\boldsymbol{k}, t) + \boldsymbol{f}^*(-\boldsymbol{k}, t)], \\ \dot{\boldsymbol{E}}(\boldsymbol{k}, t) &= -ikN(k)[\boldsymbol{f}(\boldsymbol{k}, t) - \boldsymbol{f}^*(-\boldsymbol{k}, t)], \end{aligned}\right\} \qquad (100,8)$$

где $N$ — множитель пропорциональности. Точкой обозначено дифференцирование по времени.

Нетрудно видеть, что при таком представлении $\boldsymbol{E}(\boldsymbol{k}, t)$ условие (100,7) выполняется автоматически.

Подставляя значения $\boldsymbol{E}(\boldsymbol{k}, t)$ и $\dot{\boldsymbol{E}}(\boldsymbol{k}, t)$ в (100,6), приходим к двум уравнениям:

$$\left.\begin{aligned} i\frac{\partial \boldsymbol{f}}{\partial t} &= k\boldsymbol{f}, \\ -i\frac{\partial \boldsymbol{f}^*}{\partial t} &= k\boldsymbol{f}^*. \end{aligned}\right\} \qquad (100,9)$$

Подчеркнем, что уравнения (100,9) представляют собой не что иное, как другую форму записи уравнений Максвелла. Умножая (100,9) на $\hbar$, получаем

$$\left.\begin{aligned} i\hbar\frac{\partial \boldsymbol{f}}{\partial t} &= p\boldsymbol{f}, \\ -i\hbar\frac{\partial \boldsymbol{f}^*}{\partial t} &= p\boldsymbol{f}^*. \end{aligned}\right\} \qquad (100,10)$$

Мы видим, что функция $\boldsymbol{f}(\boldsymbol{k}, t)$ удовлетворяет уравнению, которое по форме является тождественным с уравнением Шредингера. Если заменить $p$ оператором $\hat{H}$, то функцию $\boldsymbol{f}(\boldsymbol{k}, t)$ следует отождествить с волновой функцией фотона в $k$-представлении.

Множитель пропорциональности $N$, остававшийся до сих пор произвольным, можно определить из сопоставления (100,4) и (100,5).

Подставляя в (100,5) разложение (100,8), имеем

$$\varepsilon = \frac{1}{4\pi} \int \boldsymbol{E}(\boldsymbol{k}, t) \boldsymbol{E}(\boldsymbol{k}, t) \exp[i(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{k}')\boldsymbol{r}]\, d\boldsymbol{k}\, d\boldsymbol{k}'\, dV =$$
$$= \frac{1}{4\pi} \int \boldsymbol{E}(\boldsymbol{k}, t) \boldsymbol{E}(\boldsymbol{k}', t)\, d\boldsymbol{k}\, d\boldsymbol{k}' \int \exp[i(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{k}')\boldsymbol{r}]\, dV =$$
$$= \frac{(2\pi)^3}{4\pi} \int (\boldsymbol{E}(\boldsymbol{k}, t) \boldsymbol{E}(\boldsymbol{k}', t)\, \delta(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{k}')\, d\boldsymbol{k}\, d\boldsymbol{k}' =$$
$$= 2\pi^2 \int \boldsymbol{E}(\boldsymbol{k}, t) \boldsymbol{E}(-\boldsymbol{k}, t)\, d\boldsymbol{k} = 4\pi^2 \int N^2(k)\, \boldsymbol{f}(\boldsymbol{k})\, \boldsymbol{f}^*(\boldsymbol{k})\, d\boldsymbol{k}.$$

При $N = \sqrt{\frac{ck\hbar}{4\pi^2}}$ энергия электромагнитного поля и энергия фотона оказываются тождественными. Итак, в $k$-представлении фотон описывается волновой функцией

$$\psi(\boldsymbol{k}, t) = \boldsymbol{f}(\boldsymbol{k}, t),$$

причем выполнено условие

$$\int \boldsymbol{f}^* \boldsymbol{f}\, d\boldsymbol{k} = 1.$$

При этом уравнения Максвелла для электромагнитного поля монохроматической волны оказываются тождественными с уравнениями Шредингера для отдельного фототока. Вводя явную зависимость от времени, можно написать

$$\psi(\boldsymbol{k}, t) = \boldsymbol{f}_0(\boldsymbol{k}) \exp(-i\omega t) = \boldsymbol{f}_0(\boldsymbol{k}) \exp\left[-\frac{i}{\hbar}(\varepsilon t)\right].$$

Амплитуда в $k$-пространстве в силу уравнения Максвелла

$$\operatorname{div} \boldsymbol{E} = 0$$

удовлетворяет условию

$$\boldsymbol{k}\boldsymbol{f}_0(\boldsymbol{k}) = 0.$$

Мы не будем останавливаться на вопросах нормировки волновой функции и на расчете других квантовомеханических величин фототока, например, момента, спина, четности и т. д., отсылая интересующихся к монографии А. И. Ахиезера и В. Б. Берестецкого[1]).

Ограничимся лишь несколькими принципиально важными замечаниями. Подчеркнем прежде всего, что поскольку уравнения Максвелла являются релятивистски-инвариантными, уравнение Шредингера для фотона также релятивистски-инвариантно.

---

[1]) А. И. Ахиезер, В. Б. Берестецкий, Квантовая электродинамика, «Наука», 1969.

Это и естественно, поскольку фотон всегда движется со скоростью света.

Мы нашли волновую функцию фотона в $k$-представлении (или, что то же самое, в $p$-представлении). Эта волновая функция имеет обычный вероятностный смысл. Однако волновой функции фотона в $x$-представлении, позволяющей установить вероятность локализации фотона в данной точке пространства, не существует.

Для свободных частиц с массой покоя $m_0$, отличной от нуля, волновая функция в $x$-представлении получается из волновой функции в $p$-представлении путем преобразования Фурье.

В случае фотонов обратное фурье-преобразование дает

$$\boldsymbol{f}(\boldsymbol{r}, t) = 1/(2\pi)^3 \int \boldsymbol{f}(\boldsymbol{k}, t) \exp(i\boldsymbol{kr})\, d\boldsymbol{k}.$$

Однако, и в этом существенное отличие фотонов от частиц с $m_0 \neq 0$, положение фотона может быть определено только в результате взаимодействия с заряженными частицами, например, электронами.

Это взаимодействие определяется значением векторов поля $\boldsymbol{E}$ и $\boldsymbol{H}$ в той точке, в которой находится электрон. Напряженность поля в некоторой точке определяется обратным преобразованием Фурье, т. е.

$$\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r}, t) = 1/(2\pi)^3 \int \boldsymbol{E}(\boldsymbol{k}, t) \exp(i\boldsymbol{kr})\, d\boldsymbol{k} =$$
$$= 1/(2\pi^4) \int (c\hbar k)^{1/2} [\boldsymbol{f}(\boldsymbol{k}, t) + \boldsymbol{f}^*(-\boldsymbol{k}, t)] \exp(i\boldsymbol{kr})\, d\boldsymbol{k}.$$

Последняя формула показывает, что напряженность поля не выражается через $\boldsymbol{f}(\boldsymbol{r}, t)$, т. е. не определяется значением какой-либо волновой функции в той же точке пространства. Наоборот, $\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r}, t)$ определяется распределением $\boldsymbol{f}(\boldsymbol{r}, t)$ во всем пространстве.

Фотоны обладают спином, равным единице. Однако определение спина как собственного момента покоящейся частицы в случае фотонов теряет смысл. Поэтому разделение полного момента фотона на орбитальную и спиновую части является до известной степени условным.

Последнее важное замечание связано с описанием системы фотонов.

Фотоны непосредственно не взаимодействуют друг с другом. Поэтому волновая функция системы фотонов является волновой функцией системы невзаимодействующих частиц. Фотоны как частицы с целым спином подчиняются статистике Бозе — Эйнштейна.

При взаимодействии фотонов с другими частицами число фотонов изменяется в процессах излучения и поглощения. Фотоны

поглощаются и излучаются поодиночке. Взаимодействие фотонов с зарядами может быть описано с помощью их волновой функции (см. цитированную монографию А. И. Ахиезера и В. Б. Берестецкого). Однако гораздо эффективнее и проще это взаимодействие описывается с помощью представления вторичного квантования. Заметим, что самый метод вторичного квантования был разработан Дираком именно для этой цели.

## § 101. Квантование поля излучения

Квантовая теория электромагнитного поля, начатая работами Дирака, основана на особых приемах, в частности на методе вторичного квантования [1]).

Напомним, что в классической теории электромагнитного поля в пустоте было показано, что свободному от зарядов электромагнитному полю можно формально сопоставить некоторую механическую систему с бесконечно большим числом степеней свободы.

Разлагая вектор-потенциал электромагнитного поля $\boldsymbol{A}$ на плоские волны и принимая бесконечный набор амплитуд разложения $q_i$ за обобщенные координаты, можно было сопоставить электромагнитному полю некоторую механическую систему — набор осцилляторов поля (см. § 38 ч. I). Каждой фурье-компоненте разложения $\boldsymbol{A}$ отвечал один из осцилляторов. Поэтому полный набор осцилляторов поля включает бесконечно большое их число и, следовательно, электромагнитному полю можно было сопоставить механическую систему с бесконечно большим числом степеней свободы.

Гамильтониан этой системы запишем так:

$$H = \sum \frac{1}{2}\left(p_\lambda^2 + \omega_\lambda^2 q_\lambda^2\right) = \sum H_\lambda, \tag{101,1}$$

где $H_\lambda$ — гамильтониан $\lambda$-го осциллятора, $p_\lambda$ — обобщенный импульс, отвечающий координате $q_\lambda$, $\omega_\lambda$ — соответствующая частота. Суммирование ведется по всем значениям частот и поляризаций.

В основе квантовой теории электромагнитного поля лежит допущение, что этой аналогии можно придать непосредственное физическое содержание. Именно, предполагается, что реальное электромагнитное поле представляет квантовую систему, подчиняющуюся обычным законам квантовой механики. Оператор гамильтона $\hat{H}$ получается из классического гамильтониана (101,1) путем обычной замены механических величин, обобщенных

---

[1]) Более подробное изложение квантовой теории излучения может быть найдено в книге В. Гайтлер, Квантовая теория излучения, ИЛ, 1956.

координат и импульсов, соответствующими квантовыми операторами. Именно, заменим $q_\lambda$ и $p_\lambda$ операторами, удовлетворяющими соотношениям коммутации:

$$\hat{p}_\lambda \hat{q}_\mu - \hat{q}_\mu \hat{p}_\lambda = \frac{\hbar}{i}\delta_{\lambda\mu},$$

$$\hat{q}_\lambda \hat{q}_\mu - \hat{q}_\mu \hat{q}_\lambda = 0, \quad \hat{p}_\lambda \hat{p}_\mu - \hat{p}_\mu \hat{p}_\lambda = 0.$$

Поскольку различные осцилляторы поля являются независимыми, то операторы $\hat{p}_\lambda$ и $\hat{q}_\mu$, относящиеся к различным осцилляторам, коммутируют между собой. Тогда $\hat{H}$ будет представлять оператор Гамильтона квантовой системы. Целесообразно, однако, сделать каноническое преобразование к новым переменным (ср. с формулами (50,11)). Именно, напишем:

$$\hat{a}_\lambda = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\sqrt{\frac{\omega_\lambda}{\hbar}}\,\hat{q}_\lambda + \frac{i\hat{p}_\lambda}{\sqrt{\omega_\lambda \hbar}}\right),$$

$$\hat{a}^+_\lambda = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\sqrt{\frac{\omega_\lambda}{\hbar}}\,\hat{q}_\lambda - \frac{i\hat{p}_\lambda}{\sqrt{\omega_\lambda \hbar}}\right). \qquad (101,2)$$

В новом представлении

$$\hat{p}^2_\lambda + \omega^2_\lambda \hat{q}^2_\lambda = \hbar\omega_\lambda(\hat{a}_\lambda \hat{a}^+_\lambda + \hat{a}^+_\lambda \hat{a}_\lambda),$$

так что

$$\hat{H} = \frac{1}{2}\sum_\lambda \hbar\omega_\lambda(\hat{a}_\lambda \hat{a}^+_\lambda + \hat{a}^+_\lambda \hat{a}_\lambda).$$

Операторам $\hat{a}_\lambda$ и $\hat{a}^+_\lambda$ отвечают перестановочные соотношения

$$\left.\begin{aligned} \hat{a}_\lambda \hat{a}^+_\mu - \hat{a}^+_\mu \hat{a}_\lambda &= \delta_{\lambda\mu}, \\ \hat{a}_\lambda \hat{a}_\mu - \hat{a}_\mu \hat{a}_\lambda &= 0, \\ \hat{a}^+_\lambda \hat{a}^+_\mu - \hat{a}^+_\mu \hat{a}^+_\lambda &= 0, \end{aligned}\right\} \qquad (101,3)$$

что сразу следует из определения и перестановочных соотношений для $\hat{p}_\lambda$ и $\hat{q}_\lambda$.

С помощью (101,3) гамильтониан можно преобразовать, написав

$$\hat{a}_\lambda \hat{a}^+_\lambda = 1 + \hat{a}^+_\lambda \hat{a}_\lambda.$$

Тогда

$$\hat{H} = \sum \hbar\omega_\lambda\left(\hat{a}^+_\lambda \hat{a}_\lambda + \frac{1}{2}\right). \qquad (101,4)$$

Сравнивая выражение (101,4) для $\hat{H}$ и перестановочные соотношения (101,3) для операторов $\hat{a}$ и $\hat{a}^+$ с соответствующими выражениями (99,9) и (99,21), мы убеждаемся в их полной аналогии. Это означает, что свободное электромагнитное поле пред-

ставляет систему бозонов, именуемых обычно фотонами или световыми квантами.

Каждой плоской волне в разложении ((38,19) ч. I) отвечает один фотон. Энергия каждого фотона, согласно формуле (101,4), равна $\hbar\omega_\lambda$. Полная энергия электромагнитного поля соответственно имеет вид

$$E = \sum E_\lambda n_\lambda + \sum \frac{\hbar\omega_\lambda}{2} = \sum E_\lambda n_\lambda + E_0, \qquad (101,5)$$

где $E_\lambda = \hbar\omega_\lambda$, а $n_\lambda$ — число фотонов с энергией $E_\lambda$.

Второе слагаемое в формуле (101,5), обозначенное через $E_0$, носит название энергии нулевых колебаний электромагнитного поля. Формула (101,5) показывает, что если все $n_\lambda = 0$, т. е. в поле нет фотонов, то энергия электромагнитного поля равна $E_0$. Более того, сама величина $E_0$ бесконечно велика, так как в сумму для $E_0$ входит бесконечно большое число положительных слагаемых $\hbar\omega_\lambda$.

Наличие в энергии электромагнитного поля бесконечно большого постоянного слагаемого не сказывается на процессах взаимодействия поля с веществом — излучением, поглощением и рассеянием света, которые будут рассмотрены в этой главе. При этих процессах имеет место такое изменение состояния электромагнитного поля, при котором имеет значение лишь разность энергий двух состояний.

При образовании разности энергий нулевая энергия сокращается. Поэтому до сравнительно недавнего времени считалось, что нулевая энергия может быть принята за начало отсчета энергии и формально опущена во всех выражениях. Однако развитие квантовой электродинамики показало, что это не так и появление в формуле для энергии электромагнитного поля слагаемого $E_0$ имеет глубокий смысл.

С точки зрения современной электродинамики «пустота» — отсутствие частиц и фотонов — не есть «ничто», но есть определенное состояние поля, именуемое вакуумом. Существование вакуума и нулевых колебаний с частотами $\omega_\lambda$ сказывается на некоторых взаимодействиях между электромагнитным полем и электронами и приводит при этом к ряду наблюдавшихся эффектов.

Кратко мы коснемся вопроса о вакууме в § 116. Пока же мы не будем рассматривать нулевую энергию.

Найдем теперь импульс электромагнитного поля, свободного от зарядов. Согласно (38,25) ч. I, для импульса плоской волны имеем

$$\boldsymbol{p}_\lambda = \frac{\boldsymbol{k}_\lambda}{k_\lambda c} E_\lambda, \qquad (101,6)$$

где $\boldsymbol{k}_\lambda$ и $E_\lambda$ — соответственно волновой вектор и энергия волны.

Если перейти к квантованным выражениям и заменить $E_\lambda$ ее собственным значением, то легко получаем

$$\boldsymbol{p}_\lambda = \hbar \boldsymbol{k}_\lambda.$$

Подобно тому как $\hbar\omega_\lambda$ представляет энергию отдельного фотона, так и $\hbar\boldsymbol{k}_\lambda$ является его импульсом. Мы видим, что между энергией и импульсом фотона существует соотношение, найденное из анализа опытных данных еще до создания квантовой механики:

$$|\boldsymbol{p}_\lambda| = \frac{E_\lambda}{c}.$$

Из (101,6) вытекает, в частности, что масса покоя фотона равна нулю (см. § 14 ч. II). Полный импульс электромагнитного поля равен

$$\boldsymbol{P} = \sum \hbar \boldsymbol{k}_\lambda n_\lambda. \qquad (101,7)$$

Он определяется числами заполнения $n_\lambda$.

Перейдем теперь к формулировке уравнения Шредингера для электромагнитного поля. Оно имеет обычный вид

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H}\psi.$$

Волновая функция электромагнитного поля именуется обычно амплитудой состояния поля. Если воспользоваться гамильтонианом в представлении чисел заполнения, то амплитуда состояния электромагнитного поля также будет функцией чисел заполнения $n_\lambda$

$$\psi = \psi(n_1, n_2, \ldots n_\lambda, \ldots t).$$

Операторы $\hat{a}_\lambda^+$ и $\hat{a}_\lambda$, согласно выводам § 99, представляют собой операторы рождения и поглощения фотонов. При действии их на волновую функцию они соответственно увеличивают и уменьшают на единицу число фотонов с частотой $\omega_\lambda$. Матричные элементы этих операторов даются формулами (99,6), (99,7).

## § 102. Взаимодействие электрона с излучением

Проведя квантование свободного электромагнитного поля, мы можем перейти к рассмотрению системы, состоящей из электромагнитного поля и частиц. Будем считать, что в поле излучения находится один электрон и найдем взаимодействие между электроном и электромагнитным полем. В этой главе мы будем предполагать, что электрон имеет скорость малую по сравнению со скоростью света и описывается нерелятивистским гамильтонианом. Напишем гамильтониан системы (поле излучения +

+ электрон) в виде

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\left(\hat{\boldsymbol{p}} - \frac{e}{c}\hat{\boldsymbol{A}}\right)^2 + \hat{H}_{\text{изл}}.$$

Мы предполагаем, что скалярный потенциал $\varphi$ выбран равным нулю, а условие калибровки (см. (10,5) ч. 1) векторного потенциала $\boldsymbol{A}$ имеет вид

$$\operatorname{div}\boldsymbol{A} = 0.$$

Из этого соотношения следует, что оператор импульса $\hat{\boldsymbol{p}}$ коммутирует с вектором $\boldsymbol{A}$, и поэтому гамильтониан $\hat{H}$ может быть переписан как

$$\hat{H} = \frac{\hat{\boldsymbol{p}}^2}{2m} - \frac{e}{mc}(\hat{\boldsymbol{p}}\hat{\boldsymbol{A}}) + \frac{e^2}{2mc^2}\hat{\boldsymbol{A}}^2 + \hat{H}_{\text{изл}}. \qquad (102,1)$$

Первое слагаемое в (102,1) представляет гамильтониан свободной частицы, последнее — гамильтониан свободного поля излучения. Гамильтониан взаимодействия электрона с полем излучения, ответственный за все процессы испускания и поглощения фотонов электроном, имеет вид

$$\hat{H}' = -\frac{e}{mc}(\hat{\boldsymbol{p}}\hat{\boldsymbol{A}}) + \frac{e^2}{2mc^2}\hat{\boldsymbol{A}}^2. \qquad (102,2)$$

Мы будем формально считать заряд электрона малым параметром, по которому проводится разложение теории возмущений. В дальнейшем мы увидим, что фактически разложение ведется по степеням малой величины $\frac{e^2}{\hbar c}\left(\frac{e^2}{\hbar c} = \frac{1}{137}\right)$, которая фигурирует в соответствующих матричных элементах и именуется константой взаимодействия. Мы ограничимся рассмотрением некоторых простейших процессов в первом неисчезающем приближении теории возмущений. Общие выражения для вероятностей различных процессов были получены нами в § 56, и наша задача сводится к вычислению матричных элементов оператора взаимодействия $\hat{H}'$, рассматриваемого как оператор возмущения. Разложение вектора-потенциала удобно представить в виде (38,19) ч. I:

$$\boldsymbol{A} = \sum_{\lambda}(b_\lambda \boldsymbol{A}_\lambda + b_\lambda^* \boldsymbol{A}_\lambda^*),$$

где

$$\boldsymbol{A}_\lambda = \boldsymbol{e}_\lambda \sqrt{\frac{4\pi c^2}{V}}\, e^{i\boldsymbol{k}_\lambda \boldsymbol{r}}. \qquad (102,3)$$

Переходим к квантовым операторам:

$$\hat{\boldsymbol{A}} = \sum_{\lambda}(\hat{b}_\lambda \boldsymbol{A}_\lambda + \hat{b}_\lambda^+ \boldsymbol{A}_\lambda^*). \qquad (102,3')$$

Используя соотношения (38,20) ч. I, выражаем операторы $\hat{b}_\lambda$ и $\hat{b}_\lambda^+$ через операторы $\hat{q}_\lambda$ и $\hat{p}_\lambda$:

$$\hat{b}_\lambda = \frac{1}{2\omega_\lambda}(\omega_\lambda \hat{q}_\lambda + i\hat{p}_\lambda), \quad \hat{b}_\lambda^+ = \frac{1}{2\omega_\lambda}(\omega_\lambda \hat{q}_\lambda - i\hat{p}_\lambda).$$

Используя формулы (101,2), введем операторы $\hat{a}_\lambda$ и $\hat{a}_\lambda^+$. Тогда получим

$$\hat{b}_\lambda = \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_\lambda}}\,\hat{a}_\lambda, \quad \hat{b}_\lambda^+ = \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_\lambda}}\,\hat{a}_\lambda^+. \tag{102,4}$$

Сравнивая с (99,6), (99,7), находим, что операторы $\hat{b}_\lambda$ и $\hat{b}_\lambda^+$ имеют следующие отличные от нуля матричные элементы:

$$\left.\begin{aligned} (n_1, \ldots n_\lambda, \ldots | \hat{b}_\lambda | n_1, \ldots n_\lambda + 1, \ldots) &= \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_\lambda}(n_\lambda + 1)}, \\ (n_1, \ldots n_\lambda, \ldots | \hat{b}_\lambda^+ | n_1, \ldots n_\lambda - 1, \ldots) &= \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_\lambda} n_\lambda}. \end{aligned}\right\} \tag{102,5}$$

Таким образом, матричные элементы вектора-потенциала отличны от нуля только для процессов излучения и поглощения одного фотона. Для оператора $(\hat{\boldsymbol{A}})^2$, входящего в (102,2), имеем

$$(\hat{\boldsymbol{A}})^2 = \sum_{\lambda, \lambda'} \left\{\hat{b}_\lambda \hat{b}_{\lambda'} (\boldsymbol{A}_\lambda \boldsymbol{A}_{\lambda'}) + \hat{b}_\lambda \hat{b}_{\lambda'}^+ (\boldsymbol{A}_\lambda \boldsymbol{A}_{\lambda'}^*) + \hat{b}_\lambda^+ \hat{b}_{\lambda'} (\boldsymbol{A}_\lambda^* \boldsymbol{A}_{\lambda'}) + \hat{b}_\lambda^+ \hat{b}_{\lambda'}^+ (\boldsymbol{A}_\lambda^* \boldsymbol{A}_{\lambda'}^*)\right\}. \tag{102,6}$$

Из этого выражения видно, что матричные элементы оператора $(\hat{\boldsymbol{A}})^2$ отличны от нуля для двухфотонных переходов, т. е. при испускании или поглощении двух фотонов или испускании одного фотона и поглощения другого.

В процессы, идущие с участием двух фотонов, дает вклад как оператор, содержащий $\hat{\boldsymbol{A}}^2$, так и оператор $-\frac{e}{mc}(\hat{\boldsymbol{p}}\hat{\boldsymbol{A}})$, но уже во втором приближении теории возмущений. Вероятность двухфотонных переходов мала по сравнению с вероятностью однофотонных переходов. Последняя определяется оператором возмущения $-\frac{e}{mc}(\hat{\boldsymbol{p}}\hat{\boldsymbol{A}})$.

Вектор-потенциал (102,3) описывает состояние фотона с заданным импульсом. С таким же успехом можно ввести понятие о состоянии фотона с заданным моментом количества движения. Чтобы найти выражение для вектора-потенциала, описывающего состояние фотона с заданным полным моментом количества движения и его проекций на ось $z$, мы должны были бы произвести разложение вектора-потенциала $\boldsymbol{A}$ не по плоским, а по сферическим волнам. Амплитуды разложения должны рассматриваться как операторы в пространстве чисел заполнения, удовлетворяю-

щие коммутационным соотношениям такого же типа, что и (101,3). В состоянии с заданным импульсом момент количества движения фотона не имеет определенного значения. Это соответствует тому, что плоская волна может быть представлена в виде разложения по бесконечному ряду сферических волн.

Фотон обладает определенными «внутренними» степенями свободы, так как при описании его состояния необходимо учесть различные возможные поляризации.

Обычно «внутреннее» состояние системы связывается с ее спином. Однако определение спина системы, как ее «собственного» момента количества движения, т. е. момента количества движения в состоянии покоя, к фотону неприменимо. Фотон в любой системе отсчета движется со скоростью $c$.

Тем не менее и для фотона иногда оказывается удобным ввести понятие спина, представив оператор полного момента количества движения в виде суперпозиции оператора орбитального момента и оператора спина. При этом, как оказывается, спин фотона следует считать равным единице. В соответствии с тремя возможными проекциями спина $s_z = 0, \pm 1$, казалось бы фотон может находиться в трех различных состояниях с разной поляризацией. Однако условие поперечности электромагнитных волн приводит к тому, что фактически возможны лишь две проекции спина, которые и соответствуют двум независимым состояниям поляризации фотона. Подробное рассмотрение затронутых здесь вопросов читатель найдет в монографии А. И. Ахиезера и В. Б. Берестецкого [1]).

## § 103. Поглощение и излучение света

Рассмотрим вероятность однофотонного перехода — процесс поглощения и излучения. Выпишем прежде всего матричные элементы, отвечающие поглощению и излучению фотона с частотой $\omega_\lambda$. Предположим, что электрон находился в начальном состоянии $\psi_1$ до поглощения и в состоянии $\psi_2$ после поглощения. Переход $1 \to 2$ идет с поглощением, а $2 \to 1$ с излучением фотона частоты $\omega_\lambda$. Матричный элемент оператора возмущения (102,2) для перехода с поглощением фотона имеет вид

$$(2,\ n_\lambda - 1 \,|\, \hat{H}' \,|\, 1,\ n_\lambda) = -\frac{e}{mc}\int \psi_2^* (\hat{p}\mathbf{e}_\lambda) \sqrt{\frac{4\pi c^2}{V}}\, e^{i\mathbf{k}_\lambda \mathbf{r}} (b_\lambda)_{n_\lambda - 1,\, n_\lambda} \times \psi_1\, dV = -\frac{e}{m}\sqrt{\frac{2\pi\hbar n_\lambda}{V\omega_\lambda}} \int \psi_2^* (\hat{p}\mathbf{e}_\lambda)\, e^{i\mathbf{k}_\lambda \mathbf{r}} \psi_1\, dV. \qquad (103,1)$$

---

[1]) А. И. Ахиезер и В. Б. Берестецкий, Квантовая электродинамика, «Наука», 1969.

Аналогично для процесса излучения фотона имеем

$$(1,\ n_\lambda+1\,|\,\widehat{H}'\,|\,2,\ n_\lambda) = -\frac{e}{m}\sqrt{\frac{2\pi\hbar\,(n_\lambda+1)}{V\omega_\lambda}}\int \psi_1^*\,(\widehat{\boldsymbol{p}}\boldsymbol{e}_\lambda)\,e^{-i\boldsymbol{k}_\lambda\boldsymbol{r}}\,\psi_2\,dV. \tag{103,2}$$

Вероятность перехода в единицу времени с поглощением фотона дается формулой (см. § 56)

$$dW = \frac{2\pi}{\hbar}\,|\,(2,\ n_\lambda-1\,|\,\widehat{H}'\,|\,1,\ n_\lambda)\,|^2\,\rho(\omega)\,d\Omega. \tag{103,3}$$

Здесь $d\Omega$ — элемент телесного угла, отвечающий направлению распространения фотона до поглощения. Будем считать, что состояния 1 и 2 электрона принадлежат дискретному спектру. В этом случае конечное состояние системы с энергией $E_2$ принадлежит дискретному спектру, а начальное — с энергией $E_1 + \hbar\omega$ — непрерывному спектру (поскольку частота $\omega$ изменяется непрерывным образом). При этом поглощаемый фотон может принадлежать любому из осцилляторов, находящихся в интервале состояний $d\omega\,d\Omega$ в объеме $V$. Число таких осцилляторов при данной поляризации на единицу объема дается формулой (38,23) ч. I. Переходя к непрерывному распределению частот, мы будем опускать индекс $\lambda$ там, где это не может повести к недоразумениям или заменять его на индекс $\boldsymbol{k}$.

Под $\rho(\omega)$ в выражении (103,3) нужно понимать число осцилляторов в объеме $V$, приходящихся на единичный энергетический и угловой интервал при данной поляризации:

$$\rho(\omega) = \frac{\omega^2 V}{(2\pi c)^3\,\hbar}. \tag{103,4}$$

Для вероятности перехода в единицу времени с учетом (103,1) получаем

$$dW = \frac{e^2\omega}{m^2 2\pi\hbar c^3}\,|\,((\widehat{\boldsymbol{p}}\boldsymbol{e})\,e^{i\boldsymbol{k}\boldsymbol{r}})_{21}\,|^2\,n_{\boldsymbol{k}}\,d\Omega. \tag{103,5}$$

Вероятность поглощения равна нулю для всех энергий, кроме тех, которые удовлетворяют закону сохранения

$$E_2 = E_1 + \hbar\omega. \tag{103,6}$$

Определим интенсивность $J_0(\omega)$ падающего излучения, приходящегося на интервал частот $d\omega$ и угловой интервал $d\Omega$. Так как на один осциллятор приходится $n_{\boldsymbol{k}}$ фотонов с данной поляризацией, то имеем

$$J_0(\omega)\,d\omega\,d\Omega = n_{\boldsymbol{k}}\hbar\omega c\rho\hbar\,d\omega\,d\Omega = n_{\boldsymbol{k}}\hbar\frac{\omega^3\,d\omega\,d\Omega}{(2\pi)^3\,c^2}.$$

Полная вероятность пропорциональна интенсивности падающего излучения. Вероятность излучения фотона электроном легко подсчитать совершенно аналогичным образом.

Вероятность перехода в единицу времени с излучением фотона с импульсом $\hbar\boldsymbol{k}$ и поляризацией $\boldsymbol{e}$ дается опять формулой типа (103,3)

$$dW = \frac{e^2\omega}{m^2 2\pi\hbar c^3}|((\hat{\boldsymbol{p}}\boldsymbol{e})\,e^{-i\boldsymbol{kr}})_{12}|^2(n_{\boldsymbol{k}}+1)\,d\Omega. \qquad (103,7)$$

Вероятность излучения отлична от нуля, если частота испущенного кванта равна

$$\hbar\omega = E_2 - E_1. \qquad (103,8)$$

Мы видим далее, что вероятность перехода $2\to 1$ с излучением фотона, даваемая формулой (103,7), состоит из двух членов Один из них пропорционален интенсивности излучения (числу фотонов $n_{\boldsymbol{k}}$), имевшейся до акта излучения. Первоначально имевшееся электромагнитное поле воздействует на электрон, способствуя его переходу в новое состояние с излучением дополнительного фотона. Это излучение именуется индуцированным или вынужденным. На существование индуцированного излучения впервые указал Эйнштейн еще до возникновения современной квантовой теории излучения. Второй член в формуле (103,7) не зависит от интенсивности первоначального излучения и обеспечивает возможность излучения и в том случае, когда до акта излучения электромагнитное поле не было возбуждено (число фотонов $n_{\boldsymbol{k}}=0$). Излучение этого типа называется спонтанным или самопроизвольным излучением.

Из сравнения формул (103,5) и (103,7) следует с учетом эрмитовости матричных элементов, что для отношения вероятностей излучения и поглощения фотона можно написать:

$$\frac{dW_{\text{изл}}}{dW_{\text{погл}}} = \frac{n_{\boldsymbol{k}}+1}{n_{\boldsymbol{k}}}. \qquad (103,9)$$

В дальнейшем (см. § 12 ч. VI) будет показано, что из (103,9) непосредственно следует формула Планка для распределения интенсивности в излучении черного тела.

Покажем теперь, что поглощать и излучать фотоны могут только электроны, находящиеся в связанном состоянии. Для этого вычислим интегралы, входящие в матричные элементы для вероятностей перехода, считая электрон свободным. Волновые функции $\psi_1$ и $\psi_2$ запишутся в виде плоских волн

$$\psi_1 = Ce^{i/\hbar\cdot\boldsymbol{p}_1\boldsymbol{r}}, \quad \psi_2 = Ce^{i/\hbar\cdot\boldsymbol{p}_2\boldsymbol{r}}.$$

$C$ — постоянная нормировки. Подставляя эти волновые функции в (103,2), мы без труда находим:

$$\int \psi_1^*\left(\frac{\hbar}{i}\nabla\boldsymbol{e}\right)e^{-i\boldsymbol{kr}}\psi_2\,dV = |C|^2\int e^{-i/\hbar\cdot\boldsymbol{p}_1\boldsymbol{r}}\left(\frac{\hbar}{i}\boldsymbol{e}\nabla\right)e^{i/\hbar\,(\boldsymbol{p}_2-\hbar\boldsymbol{k})\,\boldsymbol{r}}\,dV \sim$$

$$\sim \delta(\boldsymbol{p}_2 - \hbar\boldsymbol{k} - \boldsymbol{p}_1). \qquad (103,10)$$

Формула (103,10) выражает закон сохранения импульса при взаимодействии фотона со свободным электроном. Кроме того, при переходе имеет место закон сохранения энергии. Таким образом, должны одновременно выполняться равенства

$$\boldsymbol{p}_2 = \boldsymbol{p}_1 + \hbar\boldsymbol{k}, \qquad (103,11)$$

$$E_2 = E_1 + \hbar\omega. \qquad (103,12)$$

Нетрудно видеть, что уравнения (103,11) и (103,12) несовместны. Аналогичное заключение относится, конечно, и к случаю поглощения.

Для того чтобы законы сохранения энергии и импульса могли выполняться одновременно, необходимо участие третьего тела, которому и передается избыток импульса. В случае атомных электронов таким телом может служить ядро атома.

## § 104. Дипольные переходы в атомных системах

Матричный элемент для процесса излучения фотона (103,2) в большинстве случаев может быть существенно упрощен. Обычно длина волны испускаемого фотона значительно больше линейных размеров той области пространства, в которой волновые функции электрона $\psi_1$ и $\psi_2$ заметно отличны от нуля.

Пусть, например, электрон движется в атоме, эффективный радиус которого равен $a$. Тогда волновые функции начального и конечного состояний весьма малы вне области радиуса $a$. Энергия электрона в поле ядра с эффективным зарядом $Z^*$ по порядку величины равна $\frac{Z^*e^2}{a}$. Того же порядка и изменение энергии атома $\Delta E$ при переходе, а следовательно, и энергия излучаемого фотона. Тогда длина излучаемой волны $\lambda \approx \frac{c}{\omega} \approx \frac{\hbar c}{\hbar\omega} \approx \frac{\hbar c a}{Z^*e^2}$. Отношение размеров атома к длине волны по порядку величины равно

$$\frac{a}{\lambda} \approx \frac{Z^*e^2}{\hbar c} \approx \frac{Z^*}{137}.$$

Для внешних электронов $Z^* \approx 1$ и длина волны существенно больше размеров атома. В случае рентгеновского излучения, возникающего при переходах в $K$-оболочке тяжелых атомов, это приближение оказывается уже недостаточным. При $\lambda \gg a$ показатель экспоненциальной функции, стоящей под знаком интеграла в (103,2), очень мал в пределах эффективной области интегрирования и поэтому множитель $e^{-i\boldsymbol{kr}}$ можно заменить на единицу.

Вероятность перехода с излучением (103,7) перепишется при этом в виде

$$dW = \frac{e^2\omega}{m^2 2\pi\hbar c^3} \,|\, (p_e)_{12} \,|^2 (n_k + 1)\, d\Omega. \qquad (104,1)$$

Здесь $\hat{p}_e$ — оператор проекции импульса частицы на направление поляризации испущенного кванта.

Матричный элемент оператора импульса можно выразить через матричный элемент координаты. Согласно (31,7) и (49,5), имеем

$$(\boldsymbol{p})_{12} = m\,(\boldsymbol{v})_{12} = m\,(\dot{\boldsymbol{r}})_{12} = \frac{im}{\hbar}\,(E_1 - E_2)\,(\boldsymbol{r})_{12} = -\,\frac{im}{e}\,\omega\,(\boldsymbol{d})_{12}, \qquad (104,2)$$

где $\boldsymbol{d}$ — дипольный момент частицы. Подставляя (104,2) в (104,1), получаем

$$dW = \frac{\omega^3}{2\pi\hbar c^3} \,|\, (d_e)_{12} \,|^2 (n_k + 1)\, d\Omega, \qquad (104,3)$$

$d_e$ — проекция вектора дипольного момента частицы на направление поляризации. Мы видим, что вероятность перехода (104,3) зависит от матричного элемента дипольного момента частицы и поэтому такие переходы называются дипольными, а излучение — дипольным излучением. Если обозначить угол между $(\boldsymbol{d})_{12}$ и направлением поляризации излучения через $\theta$, то выражение (104,3) можно переписать как

$$dW = \frac{\omega^3}{2\pi\hbar c^3} \,|\, (\boldsymbol{d})_{12} \,|^2 \cos^2\theta\, (n_k + 1)\, d\Omega. \qquad (104,4)$$

Просуммируем последнее выражение по поляризациям кванта. За независимые направления поляризации выбираем поляризацию в плоскости $\boldsymbol{d}$, $\boldsymbol{k}$ и поляризацию в направлении, перпендикулярном этой плоскости. Выражение (104,4) при этом приводится к виду

$$dW = \frac{\omega^3}{2\pi\hbar c^3} \,|\, \boldsymbol{d}_{12} \,|^2 (n_k + 1) \sin^2\vartheta\, d\Omega, \qquad (104,5)$$

где $\vartheta$ — угол между вектором $\boldsymbol{d}_{12}$ и направлением распространения излучения $\boldsymbol{k}$.

Интенсивность излучения в единицу времени в элемент телесного угла $d\Omega$ получится при умножении (104,5) на энергию фотона $\hbar\omega$. Для спонтанного излучения имеем

$$J\, d\Omega = \frac{\omega^4}{2\pi c^3} \,|\, \boldsymbol{d}_{12} \,|^2 \sin^2\vartheta\, d\Omega\,. \qquad (104,6)$$

Проинтегрировав по углам, найдем полное спонтанное излучение в единицу времени

$$\frac{dE}{dt} = \frac{4\omega^4}{3c^3} \,|\, \boldsymbol{d}_{12} \,|^2\,. \qquad (104,7)$$

Найденное выражение весьма сходно с классической формулой для интенсивности дипольного излучения (см. (27,9) ч. I). Различие между классической и квантовой формулами заключается лишь в том, что усредненный квадрат дипольного момента $\overline{\boldsymbol{d}^2}$, входящий в классическое выражение, нужно заменить на соответствующий матричный элемент (удвоенный) $2|\boldsymbol{d}_{12}|^2$.

Аналогичным образом можно рассмотреть дипольные переходы при поглощении света. Полагая в (103,1) $e^{i\boldsymbol{kr}} = 1$ и учитывая (104,2), получаем для вероятности перехода в единицу времени

$$dW = \frac{\omega^3}{2\pi\hbar c^3} |\boldsymbol{d}_{21}|^2 \cos^2\theta n_{\boldsymbol{k}}\, d\Omega. \tag{104,8}$$

Усредняя это выражение по всем ориентациям вектора $\boldsymbol{d}$ по отношению к направлению падающего излучения, находим

$$\overline{\cos^2\theta} = \frac{1}{4\pi}\int \cos^2\theta\, d\Omega = \frac{1}{3}. \tag{104,9}$$

Выражая $n_{\boldsymbol{k}}$ через интенсивность падающего излучения $J_0(\omega)$ и умножая (104,8) на $\hbar\omega$, найдем энергию, поглощаемую за единицу времени

$$J\, d\Omega = \frac{4\pi^2}{3}\frac{e^2}{\hbar c}\omega |\boldsymbol{r}_{21}|^2 J_0(\omega)\, d\Omega. \tag{104,10}$$

До сих пор мы рассматривали поглощение и излучение фотона одним электроном. Если поглощающая или излучающая система содержит несколько электронов, то, пренебрегая взаимодействием между ними, можно считать, что формулы (104,10), (104,5) останутся справедливыми, если только заменить в них дипольный момент электрона суммой дипольных моментов всех электронов.

## § 105. Квадрупольное и магнитное дипольное излучения

Матричные элементы дипольного перехода получаются из общего выражения (103,2) при замене экспоненциальной функции $e^{-i\boldsymbol{kr}}$ единицей. Может оказаться, однако, что матричный элемент дипольного перехода обращается в нуль, тогда как точный матричный элемент (103,2) отличен от нуля. В этом случае следует разложить экспоненту $e^{-i\boldsymbol{kr}}$ в ряд, выписав старшие члены разложения. При этом вероятность излучения будет отлична от нуля, хотя и существенно меньше вероятности дипольного излучения. По этой причине такие переходы называются запрещенными. Вероятность излучения, обусловленная следующим членом разложения, будет иметь вид

$$dW = \frac{e^2\omega^3}{2\pi\hbar c^3} |(r_e(\boldsymbol{kr}))_{21}|^2 (n_{\boldsymbol{k}} + 1)\, d\Omega. \tag{105,1}$$

Интенсивность спонтанного излучения при таком переходе аналогично (104,6) будет равна

$$J\,d\Omega = \frac{e^2\omega^4}{2\pi c^3} \left| (\boldsymbol{r}\,(\boldsymbol{kr}))_{21} \right|^2 \sin^2\vartheta\, d\Omega. \qquad (105,2)$$

Сравнивая последнюю формулу с классическим выражением § 31 ч. I, мы видим, что (105,2) представляет совокупность магнитного дипольного и квадрупольного излучений. Вероятность запрещенного излучения (магнитного дипольного и квадрупольного) относится к вероятности разрешенного дипольного излучения, как $\frac{a^2}{\lambda^2}\left(k \approx \frac{1}{\lambda},\ r \approx a\right)$. Если почему-либо равны нулю матричные элементы (105,1), то аналогично можно найти вероятность излучения высшего порядка.

## § 106. Правила отбора

Мы видим, что характер излучения атомных и ядерных систем определяется матричным элементом $\boldsymbol{d}_{21} = e\boldsymbol{r}_{21}$. Установим теперь, когда этот матричный элемент может быть отличен от нуля, т. е. между какими состояниями системы возможны переходы, сопровождающиеся дипольным излучением. Совокупность требований, которым должны удовлетворять волновые функции начального и конечного состояний системы, для того чтобы матричный элемент дипольного перехода $\boldsymbol{r}_{21}$ не обращался в нуль, называются правилами отбора для дипольного излучения. Правила отбора могут быть легко сформулированы в общем виде, если волновые функции $\psi_1$ и $\psi_2$ описывают состояние частицы, движущейся в центрально-симметричном поле. В этом случае зависимость $\psi_1$ и $\psi_2$ от углов характеризуется сферическими функциями (см. § 35). Для того чтобы в системе были возможны дипольные переходы, должен быть отличен от нуля матричный элемент проекции радиуса-вектора на направление поляризации кванта $\boldsymbol{e}$. Рассмотрим сперва квант, поляризованный по оси $z$. В этом случае $r_e = z = r\cos\vartheta$. Матричный элемент дипольного перехода будет пропорционален интегралу

$$\int\limits_0^{\pi}\int\limits_0^{2\pi} Y^*_{l_2m_2}\cos\vartheta\, Y_{l_1m_1}\sin\vartheta\, d\vartheta\, d\varphi. \qquad (106,1)$$

Здесь $l_1$, $m_1$ и $l_2$, $m_2$ — квантовые числа состояний системы до и после излучения кванта. Учитывая определение сферических функций (30,16), интеграл (106,1) можно переписать в виде

$$\int\limits_0^{\pi} P_{l_2}^{m_2}(\cos\vartheta)\, P_{l_1}^{m_1}(\cos\vartheta)\cos\vartheta\sin\vartheta\, d\vartheta \int\limits_0^{2\pi} e^{i(m_1-m_2)\varphi}\, d\varphi. \qquad (106,2)$$

Интеграл по углу $\varphi$ отличен от нуля только при $m_1 = m_2$. Интеграл по углу $\vartheta$ имеет при этом вид

$$\int_{-1}^{1} P_{l_2}^m(x)\, x P_{l_1}^m(x)\, dx. \tag{106,3}$$

Можно показать, что для присоединенных полиномов Лежандра справедливо следующее соотношение [1]):

$$xP_l^m(x) = \frac{l+|m|}{2l+1} P_{l-1}^m(x) + \frac{l-|m|+1}{2l+1} P_{l+1}^m(x). \tag{106,4}$$

Подставляя это выражение в (106,3) и учитывая условия ортогональности присоединенных полиномов Лежандра, получаем, что интеграл (106,3) отличен от нуля только при $l_2 = l_1 \pm 1$.

Мы видим, таким образом, что если излучение поляризовано по оси $z$, матричный элемент дипольного перехода отличен от нуля лишь для переходов с $m_2 = m_1$; $l_2 = l_1 \pm 1$.

Определим теперь аналогичные правила отбора для квантовых чисел $l$, $m$ в том случае, когда квант испущен в направлении оси $z$ и, следовательно, поляризован в плоскости $x$, $y$. Рассмотрим случай круговой поляризации со сдвигом фаз, равным $\frac{\pi}{2}$. Тогда вероятность перехода определяется матричным элементом от величины $x \pm iy$

$$(x \pm iy)_{21} = (r \sin\vartheta e^{\pm i\varphi})_{21}. \tag{106,5}$$

Выделяя интеграл по углу $\varphi$, получим

$$\int_0^{2\pi} e^{i(m_1 - m_2 \pm 1)\varphi}\, d\varphi. \tag{106,6}$$

Последний интеграл отличен от нуля при условии

$$m_2 = m_1 \pm 1. \tag{106,7}$$

Соответствующий интеграл по углу $\vartheta$ отличен от нуля, если $l_2 = l_1 \pm 1$. Таким образом, полученные правила отбора по квантовым числам $l$ и $m$ для дипольного перехода могут быть окончательно сформулированы в виде

$$\Delta m = 0, \quad \pm 1; \quad \Delta l = \pm 1. \tag{106,8}$$

Нетрудно сообразить, что правила отбора, даваемые соотношениями (106,8), выражают закон сохранения момента количества движения. То обстоятельство, что $l$ может изменяться на единицу, показывает, что при дипольном переходе излучаемый

---

[1]) См., например, Н. Н. Лебедев, Специальные функции и их приложения, Физматгиз, 1953, стр. 261.

квант уносит с собой момент количества движения, равный единице. На первый взгляд этот вывод может показаться странным. Действительно, мы рассматривали (формула (103,7)) переходы с излучением фотона заданного импульса. Но в состоянии с заданным импульсом и поляризацией момент количества движения фотона не имеет определенного значения. Если, однако, длина волны фотона велика по сравнению с размерами системы, то возможно разложение функции $e^{i\boldsymbol{kr}}$ в ряд. Производя это разложение и оставляя первый неисчезающий член, т. е. главный член, определяющий величину матричного элемента, мы тем самым фактически выделяем фотоны с заданным полным моментом количества движения. Дипольному излучению отвечают фотоны с моментом единица, квадрупольному — с моментом два и т. д. Прямой расчет, на котором мы останавливаться не можем, подтверждает этот вывод.

Правила отбора (106,8) автоматически удовлетворяют требованиям закона сохранения четности. Поскольку оператор $\boldsymbol{r}$ является нечетным, функции $\psi_2$ и $\psi_1$ должны иметь различную четность. Тогда при замене $\boldsymbol{r} \to (-\boldsymbol{r})$ весь матричный элемент остается неизменным.

При выводе соотношений (106,1) не учитывались спиновые состояния электрона, т. е. предполагалось, что спиновое состояние не связано с орбитальным движением. В этом случае условия (106,8) должны быть дополнены соотношением $\Delta s = 0$, которое выражает сохранение спина при дипольном переходе. Однако, если спин-орбитальным взаимодействием пренебрегать нельзя, как это имеет место, например, у тяжелых атомов и у ядер, необходимо сформулировать правила отбора для полного момента $J$. Учитывая, что при дипольном переходе квант уносит момент, равный единице, по правилу сложения моментов в квантовой механике, получаем

$$\Delta j = 0, \quad \pm 1 \quad (\text{исключая } 0 \to 0 \text{ переходы}) \qquad (106,9)$$

В этом случае переходы с $\Delta j = 0$ не запрещены, так как полный момент не связан непосредственно с четностью состояния. Переход из состояния $j_1 = 0$ в состояние $j_2 = 0$ запрещен, так как при этом невозможно удовлетворить закону сохранения полного момента.

При магнитном дипольном излучении квант также уносит момент, равный единице. Однако магнитный дипольный квант имеет четность, противоположную четности электрического дипольного кванта. Это связано с тем, что оператор магнитного момента не меняет знака при инверсии системы координат, так как магнитный момент — псевдовектор. Следовательно, матричные элементы оператора магнитного момента отличны от нуля лишь для переходов между состояниями одинаковой четности.

Электрический квадрупольный квант уносит момент, равный двум. В соответствии с этим правила отбора по полному моменту имеют вид

$$\Delta j = 0, \quad \pm 1, \quad \pm 2. \tag{106,10}$$

Запрещены переходы с моментами

$$0 \to 0; \quad \frac{1}{2} \to \frac{1}{2}; \quad 0 \rightleftarrows 1.$$

Изменение момента при излучении, даваемое соотношениями (106,9), (106,10), относится или к одной частице, если изменяется только ее состояние, или ко всей системе в целом, например к атому или ядру.

Если система находится в некотором возбужденном состоянии, и дипольный переход в низшее энергетическое состояние запрещен, то время жизни системы в этом возбужденном состоянии может быть достаточно велико. Состояния такого типа называются метастабильными. В не очень сильно разреженных газах метастабильный атом обычно отдает свою энергию возбуждения при столкновениях с другими атомами без излучения.

Переходы, связанные с изменением момента $\Delta j \approx 4{,}5$ и запрещенные в высокой степени, наблюдаются у ядер. Время жизни ядра по отношению к такому переходу при малых энергиях возбуждения может достигать нескольких месяцев. Такие ядра называются изомерными. Впервые они наблюдались И. В. Курчатовым и Л. И. Русиновым.

## § 107. Фотоэффект

Фотоэффектом называется процесс поглощения фотона связанной частицей, когда энергия фотона превышает ее энергию связи. В частности, при фотоэффекте на атоме электрон, находящийся в состоянии, принадлежащем дискретному спектру, поглощает фотон и переходит в непрерывный спектр. Кинетическая энергия $T$ электрона, вырванного из атома, определяется соотношением Эйнштейна

$$T = \hbar\omega - I, \tag{107,1}$$

где $I$ — энергия ионизации атома.

Избыток импульса, возникающий при поглощении фотона, передается ядру. Чем сильнее связан электрон в атоме, тем легче происходит передача импульса ядру. Поэтому следует ожидать, что вероятность фотоэффекта будет иметь максимальное значение для наиболее связанных электронов, электронов $K$-оболочки.

В дальнейшем мы ограничимся рассмотрением этого случая. Матричный элемент перехода с поглощением одного кванта

имеет вид (103,1). В матричном элементе волновые функции $\psi_1$ и $\psi_2$ отвечают соответственно основному состоянию электрона в атоме и состоянию, принадлежащему сплошному спектру. Так как мы не учитываем релятивистских эффектов, то очевидно, что энергия фотона, во всяком случае, должна быть мала по сравнению с энергией покоя электрона $\hbar\omega \ll mc^2$.

С другой стороны, мы исключим область, близкую к порогу фотоэффекта, и будем считать, что энергия фотона велика по сравнению с энергией ионизации атома. Эти требования с учетом (107,1) и (38,17) приводят к неравенству

$$T = \frac{p^2}{2m} \gg I = \frac{Z^2 e^4 m}{2\hbar^2} \quad \text{или} \quad \frac{Ze^2}{\hbar v} \ll 1. \tag{107,2}$$

Согласно результатам § 84, выполнение неравенства (107,2) означает, что кулоновское поле, действующее на электрон, можно рассматривать как малое возмущение. Следовательно, в качестве волновой функции $\psi_2$ свободной частицы в нулевом приближении можно взять плоскую волну (пренебрегая влиянием кулоновского поля на свободный электрон). Волновая функция электрона на $K$-оболочке может быть представлена в виде водородной функции с эффективным зарядом ядра $Z$ (влияние остальных электронов на $K$-электроны мало). Тогда имеем

$$\psi_1 = \sqrt{\frac{Z^3}{\pi a^3}}\, e^{-\frac{Zr}{a}}; \qquad \psi_2 = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\, e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{pr}}. \tag{107,3}$$

Волновую функцию конечного состояния $\psi_2$, принадлежащую к сплошному спектру, мы нормируем на $\delta$-функцию в пространстве импульсов. Вероятность перехода в единицу времени согласно (56,8′) равна

$$dW = \frac{2\pi}{\hbar} |H'_{21}|^2 \delta(E_2 - E_1 - \hbar\omega)\, p^2\, dp\, d\Omega. \tag{107,4}$$

Здесь $d\Omega$ — элемент телесного угла, характеризующего направление импульса $p$ испущенного фотоэлектрона, $E_1 = -I$, $E_2 = \frac{p^2}{2m}$.

Интегрируем (107,4) по энергиям конечного состояния:

$$dW = \frac{2\pi m}{\hbar} |H'_{21}|^2\, p\, d\Omega. \tag{107,5}$$

Величина импульса $p$ определяется соотношением (107,1). Интеграл в матричном элементе (107,5) после подстановки указанных выше волновых функций легко вычисляется. Для этого представим его в виде

$$H'_{21} = -\frac{e}{m(2\pi\hbar)} \sqrt{\frac{Z^3}{\pi a^3 V\omega}} \int e^{\frac{i(\mathbf{qr})}{\hbar}} \frac{\hbar}{i} (\mathbf{e}\nabla)\, e^{-\frac{Zr}{a}}\, dV,$$

где $\mathbf{e}$ — вектор поляризации фотона.

Здесь мы ввели вектор $\boldsymbol{q} = \hbar\boldsymbol{k} - \boldsymbol{p}$, представляющий импульс, переданный ядру, и воспользовались свойством поперечности электромагнитных волн $(\boldsymbol{ek}) = 0$. Интегрируя по частям, получаем

$$H'_{21} = -\frac{e}{m(2\pi\hbar)}\sqrt{\frac{Z^3}{\pi a^3 V\omega}}\,(\boldsymbol{ep})\int e^{-\frac{Zr}{a}} e^{\frac{i}{\hbar}(\boldsymbol{qr})}\,dV.$$

Переходя к сферическим координатам с полярной осью, направленной по вектору $\boldsymbol{q}$, находим

$$\int e^{-\frac{Zr}{a}} e^{\frac{i}{\hbar}(\boldsymbol{qr})}\,dV = \frac{2\pi\hbar}{iq}\int_0^\infty \left(e^{\frac{i}{\hbar}qr} - e^{-\frac{i}{\hbar}qr}\right) e^{-\frac{Zr}{a}}\,r\,dr = \frac{8\pi a^3}{Z^3\left(1+\frac{q^2a^2}{Z^2\hbar^2}\right)^2}.$$

Матричный элемент $H'_{21}$, следовательно, имеет вид

$$H'_{21} = -\frac{4e}{m\hbar}\sqrt{\frac{a^3}{\pi Z^3 V\omega}}\,(\boldsymbol{ep})\frac{1}{\left(1+\frac{q^2a^2}{\hbar^2Z^2}\right)^2}. \tag{107,6}$$

Дифференциальное эффективное сечение фотоэффекта мы получим, если разделим вероятность перехода в единицу времени (107,5) на плотность потока падающих фотонов. Так как поглощается один квант и процесс нормируется так, что в объеме $V$ имеется один фотон, то плотность потока падающих фотонов равна $\frac{c}{V}$. В соответствии с этим имеем

$$d\sigma = \frac{32\cdot 137^4}{Z^3}\,\frac{p\,(\boldsymbol{pe})^2 c^3}{(mc^2)^2\,\hbar\omega}\left(\frac{e^2}{mc^2}\right)^2\frac{d\Omega}{\left(1+\frac{q^2a^2}{\hbar^2Z^2}\right)^4}. \tag{107,7}$$

Константа $r_0 = \frac{e^2}{mc^2} \sim 10^{-13}$ *см*, как известно, носит название классического радиуса электрона. Выражение (107,7) можно упростить. Обозначим прежде всего через $\vartheta$ угол между направлениями импульса падающего кванта и испущенного фотоэлектрона, т. е. угол между векторами $\boldsymbol{k}$ и $\boldsymbol{p}$, а через $\varphi$ — угол между плоскостями $(\boldsymbol{pk})$ и $(\boldsymbol{ek})$. Тогда, обозначая $\hbar k = \varkappa$, имеем

$$(\boldsymbol{pe}) = p\sin\vartheta\cos\varphi, \qquad q^2 = p^2 + \varkappa^2 - 2p\varkappa\cos\vartheta. \tag{107,8}$$

Выражение $1+\frac{q^2a^2}{\hbar^2Z^2}$, входящее в (107,7), также можно переписать в более простом виде

$$1+\frac{q^2a^2}{\hbar^2Z^2} = \frac{a^2}{\hbar^2Z^2}\left(\frac{Z^2\hbar^2}{a^2}+q^2\right) = \frac{a^2}{\hbar^2Z^2}\left(\frac{Z^2m^2e^4}{\hbar^2}+p^2+\varkappa^2-2p\varkappa\cos\vartheta\right).$$

Из соотношения (107,1), учитывая, что $I = \frac{Z^2e^4m}{2\hbar^2}$, следует

$$\frac{Z^2m^2e^4}{\hbar^2}+p^2 = 2m\hbar\omega = 2m\varkappa c.$$

Тогда предыдущее соотношение перепишется как

$$1+\frac{q^2a^2}{\hbar^2Z^2}=\frac{a^2}{\hbar^2Z^2}\varkappa\,(2mc+\varkappa-2p\cos\vartheta)=\frac{a^2}{\hbar^2Z^2}2m\hbar\omega\,(1-\beta\cos\vartheta), \tag{107,9}$$

где $\beta=\frac{v}{c}$.

Здесь мы использовали условие $\varkappa c=\hbar\omega\ll mc^2$. Абсолютную величину импульса $p$, входящего в (107,5), можно заменить, согласно (107,1) и (107,2), на величину $\sqrt{2m\hbar\omega}$. Учитывая соотношения (107,9) (107,8), получаем для дифференциального эффективного сечения (107,7) следующее выражение:

$$d\sigma=4\sqrt{2}\,\frac{Z^5}{137^4}r_0^2\left(\frac{mc^2}{\hbar\omega}\right)^{\frac{7}{2}}\frac{\sin^2\vartheta\cos^2\varphi}{(1-\beta\cos\vartheta)^4}\,d\Omega. \tag{107,10}$$

Поскольку выражение (107,10) получено в нерелятивистском приближении, оно имеет смысл лишь с точностью до членов первого порядка по $\beta$. Поэтому окончательно имеем:

$$d\sigma=4\sqrt{2}\,\frac{Z^5}{137^4}r_0^2\left(\frac{mc^2}{\hbar\omega}\right)^{\frac{7}{2}}\sin^2\vartheta\cos^2\varphi\,(1+4\beta\cos\vartheta)\,d\Omega. \tag{107,11}$$

Из выражения (107,11) следует, что фотоэлектроны испускаются в основном в направлении поляризации фотона $\vartheta=\frac{\pi}{2}$; $\varphi=0$. В направлении распространения кванта ($\vartheta=0$) фотоэлектроны не вылетают. С увеличением энергии кванта максимум сильно смещается в направлении вперед. Чтобы получить полное эффективное сечение фотоэффекта на $K$-оболочке, нужно проинтегрировать (107,11) по всем углам $\vartheta$, $\varphi$ и кроме того, ввести коэффициент 2, так как на $K$-оболочке имеются два электрона:

$$\sigma=\frac{32\sqrt{2}}{3}\pi\,\frac{Z^5}{137^4}r_0^2\left(\frac{mc^2}{\hbar\omega}\right)^{\frac{7}{2}}. \tag{107,12}$$

Мы видим, что полное сечение быстро растет с увеличением заряда ядра (как $Z^5$) и уменьшается с увеличением частоты кванта $\left(\text{как } \frac{1}{\omega^{7/2}}\right)$.

## § 108. Рассеяние света атомами

В качестве важного примера процесса, идущего с участием двух фотонов, рассмотрим квантовую теорию рассеяния света атомами. Пусть на атом падает фотон с волновым вектором $\boldsymbol{k}_1$, а испускается фотон с волновым вектором $\boldsymbol{k}_2$. Соответствующие частоты обозначим через $\omega_1$ и $\omega_2$, а векторы поляризации —

через $\boldsymbol{e}_1$ и $\boldsymbol{e}_2$. Если частота падающего кванта и частота уходящего равны между собой, т. е. $\omega_1 = \omega_2$, то атом после рассеяния возвращается в исходное состояние. Такое рассеяние без изменения частоты называется когерентным. Мы видели в ч. I, что с точки зрения классической теории излучения когерентное рассеяние является единственно возможным. С квантовомеханической точки зрения столь же естественным процессом является рассеяние с изменением частоты, экспериментально обнаруженное Раманом и независимо от него Л. И. Мандельштамом и Г. С. Ландсбергом и получившее название комбинационного рассеяния.

Для общности мы будем считать, что состояние атома в акте рассеяния изменяется. Будем считать, что энергия падающего фотона меньше энергии связи электрона в атоме, что отвечает области спектра видимого света. При энергиях фотона, больших по сравнению с этой величиной, электрон можно считать свободным. Однако рассмотрение рассеяния фотона на свободном электроне (эффекта Комптона) мы отложим до § 127.

Если энергия атома в начальном состоянии $E_1$, а в конечном — $E_2$, то закон сохранения энергии дает:

$$\hbar\omega_2 = \hbar\omega_1 + E_1 - E_2. \tag{108,1}$$

Выпишем матричные элементы оператора взаимодействия $\hat{H}'$ (102,2) для процесса рассеяния. Так как в процессе принимают участие два фотона, то нужно учитывать вклад в матричный элемент оператора $\hat{\boldsymbol{A}}^2$. Обозначим оператор $-\frac{e}{mc}(\hat{\boldsymbol{p}}\hat{\boldsymbol{A}})$ через $\hat{H}_1'$, а оператор $\frac{e^2}{2mc^2}\hat{\boldsymbol{A}}^2$ через $\hat{H}_2'$. Тогда полный оператор возмущения равен

$$\hat{H}' = \hat{H}_1' + \hat{H}_2'. \tag{108,2}$$

Из (102,4) с учетом (102,5) следует, что оператор $\hat{\boldsymbol{A}}^2$ дает вклад в исследуемый процесс в первом приближении теории возмущения

$$(\hat{H}_2')_{21} = \frac{2\pi e^2}{mV}\frac{\hbar}{\sqrt{\omega_1\omega_2}}\int \psi_2^* e^{i(\boldsymbol{k}_1-\boldsymbol{k}_2)\boldsymbol{r}}(\boldsymbol{e}_1\boldsymbol{e}_2)\psi_1\,dV. \tag{108,3}$$

При рассматриваемых частотах длина волны света значительно больше размеров атома. В соответствии с этим экспоненциальную функцию в (108,3) можно положить равной единице. Учитывая также ортогональность функции $\psi_1$ и $\psi_2$, имеем

$$(\hat{H}_2')_{21} = \frac{2\pi e^2}{mV}\frac{\hbar}{\sqrt{\omega_1\omega_2}}(\boldsymbol{e}_1\boldsymbol{e}_2)\,\delta_{12}. \tag{108,4}$$

Оператор $\hat{H}_1'$ имеет отличные от нуля матричные элементы только для процессов, идущих с участием одного фотона. В слу-

чае рассеяния оператор $\hat{H}_1'$ может давать вклад в вероятность перехода лишь во втором приближении теории возмущений. В § 56 было показано, что для определения вероятности процесса во втором приближении нужно найти матричные элементы оператора $\hat{H}_1'$, соответствующие переходам в промежуточные состояния.

В процессе рассеяния возможны два типа промежуточных состояний, по которым надо произвести суммирование. 1) При переходе из начального в промежуточное состояние первого типа происходит поглощение фотона $\boldsymbol{k}_1$ и атом переходит в некоторое состояние, которое мы будем характеризовать индексом $i$ (энергия $E_i$). При последующем переходе из промежуточного состояния в конечное испускается фотон $\boldsymbol{k}_2$. Матричные элементы для перехода из начального состояния в промежуточное и из промежуточного состояния в конечное, согласно (103,1), и (103,2) имеют вид

$$\left.\begin{aligned} (\hat{H}_1')_{i1} &= -\frac{e}{m}\sqrt{\frac{2\pi\hbar}{V\omega_1}}\int \psi_i^* (\hat{\boldsymbol{p}}\boldsymbol{e}_1)\, e^{i\boldsymbol{k}_1\boldsymbol{r}}\psi_1\, dV, \\ (\hat{H}_1')_{2i} &= -\frac{e}{m}\sqrt{\frac{2\pi\hbar}{V\omega_2}}\int \psi_2^* (\hat{\boldsymbol{p}}\boldsymbol{e}_2)\, e^{-i\boldsymbol{k}_2\boldsymbol{r}}\psi_i\, dV. \end{aligned}\right\} \qquad (108,5)$$

2) При переходе в промежуточное состояние второго типа сперва происходит излучение фотона $\boldsymbol{k}_2$. Затем фотон $\boldsymbol{k}_1$ поглощается, а атом переходит из промежуточного состояния в конечное. Напомним, что закон сохранения энергии имеет место только для начального и конечного состояний. Матричные элементы перехода через второе промежуточное состояние запишутся как

$$\left.\begin{aligned} (\hat{H}_1')_{\mathrm{II}\,1} &= -\frac{e}{m}\sqrt{\frac{2\pi\hbar}{V\omega_2}}\int \psi_{\mathrm{II}}^* (\hat{\boldsymbol{p}}\boldsymbol{e}_2)\, e^{-i\boldsymbol{k}_2\boldsymbol{r}}\psi_1\, dV, \\ (\hat{H}_1')_{2\,\mathrm{II}} &= -\frac{e}{m}\sqrt{\frac{2\pi\hbar}{V\omega_1}}\int \psi_2^* (\hat{\boldsymbol{p}}\boldsymbol{e}_1)\, e^{i\boldsymbol{k}_1\boldsymbol{r}}\psi_{\mathrm{II}}\, dV. \end{aligned}\right\} \qquad (108,6)$$

Составной матричный элемент $\Lambda$ дается формулой (56,19)

$$\Lambda_{21} = \sum_i \left( \frac{(\hat{H}_1')_{2i}(\hat{H}_1')_{i1}}{E_{\text{нач}} - E_i} + \frac{(\hat{H}_1')_{2\,\mathrm{II}}(\hat{H}_1')_{\mathrm{II}\,1}}{E_{\text{нач}} - (E_i + \hbar\omega_1 + \hbar\omega_2)} \right). \qquad (108,7)$$

Энергия начального состояния складывается из энергии атома $E_1$ и энергии падающего кванта $\hbar\omega_1$, т. е.

$$E_{\text{нач}} = E_1 + \hbar\omega_1. \qquad (108,8)$$

Энергия промежуточного состояния второго типа включает в себя, помимо энергии атома, также суммарную энергию двух фотонов.

Подставляем выражения (108,5) и (108,6) в (108,7), получаем

$$\Lambda_{21} = \frac{e^2 2\pi\hbar}{m^2 V \sqrt{\omega_1\omega_2}} \sum_i \left( \frac{(e_2\hat{p})_{2i}(e_1\hat{p})_{i1}}{E_1 - E_i + \hbar\omega_1} + \frac{(e_1\hat{p})_{2i}(e_2\hat{p})_{i1}}{E_1 - E_i - \hbar\omega_2} \right). \qquad (108,9)$$

При этом мы заменили экспоненциальные выражения $e^{ik_1r}$ и $e^{-ik_2r}$ на единицы. В суммирование по энергетическим состояниям атома должно быть включено и интегрирование по состояниям, принадлежащим сплошному спектру. Полный матричный элемент для рассматриваемого процесса получится прибавлением к (108,9) матричного элемента (108,4)

$$M_{21} = \frac{2\pi e^2}{mV} \frac{\hbar}{\sqrt{\omega_1\omega_2}} \left[ \frac{1}{m} \sum_i \left( \frac{(p_2\hat{p})_{2i}(e_1\hat{p})_{i1}}{E_1 - E_i + \hbar\omega_1} + \frac{(e_1\hat{p})_{2i}(e_2\hat{p})_{i1}}{E_1 - E_i - \hbar\omega_2} \right) + \delta_{12}(e_1 e_2) \right]. \qquad (108,10)$$

Вероятность перехода в единицу времени дается, как всегда, формулой

$$dW = \frac{2\pi}{\hbar} \mid M_{21} \mid^2 \rho(\omega_2)\, d\Omega. \qquad (108,11)$$

Здесь $\rho(\omega_2)$, как и в § 103, означает число осцилляторов поля в объеме $V$, приходящихся на единичный энергетический интервал [см. (103,4)]. Элемент телесного угла $d\Omega$ характеризует направление импульса рассеянного фотона.

Разделив вероятность перехода в единицу времени (108,11) на плотность потока падающих квантов, равную, как и в предыдущем параграфе $\frac{c}{V}$, получим выражение для дифференциального эффективного сечения процесса

$$d\sigma = r_0^2 \frac{\omega_2}{\omega_1} \left| \left[ \frac{1}{m} \sum_i \left( \frac{(e_2\hat{p})_{2i}(e_1\hat{p})_{i1}}{E_1 - E_i + \hbar\omega_1} + \frac{(e_1\hat{p})_{2i}(e_2\hat{p})_{i1}}{E_1 - E_i - \hbar\omega_2} \right) + \delta_{12}(e_1 e_2) \right] \right|^2 d\Omega. \qquad (108,12)$$

Ясно, что в случае точного резонанса $\hbar\omega_1 = E_1 - E_i$ формула (108,12) неприменима.

Формула (108,12) характеризует рассеивающую способность атома как функцию частоты падающего света, и поэтому называется, как и в классической электродинамике, дисперсионной формулой. Последний член в (108,12) отличен от нуля только для когерентного рассеяния $\omega_1 = \omega_2$, при котором начальное и конечное состояния атома совпадают. Если начальное и конечное состояния атома не идентичны, то частота рассеянного излучения сдвинута по отношению к частоте падающего на величину, соответствующую разности энергетических состояний

атома (108,1). Рассеяние такого типа называется комбинационным или раман-эффектом.

Формулу (108,12) можно переписать в несколько ином виде, если выразить матричные элементы импульса через матричные элементы координаты электрона. Прежде всего удобно представить последний член в квадратных скобках в (108,12) в той же форме, что и два предыдущих.

Для этого заметим [1]), что скалярное произведение $(\boldsymbol{e}_1\boldsymbol{e}_2)$ может быть выражено как результат коммутации соответствующих проекций операторов $\hat{\boldsymbol{p}}$ и $\hat{\boldsymbol{r}}$

$$(\boldsymbol{e}_1\boldsymbol{e}_2) = \frac{i}{\hbar}\left[(\boldsymbol{e}_1\hat{\boldsymbol{p}})(\boldsymbol{e}_2\boldsymbol{r}) - (\boldsymbol{e}_2\boldsymbol{r})(\boldsymbol{e}_1\hat{\boldsymbol{p}})\right]. \qquad (108,13)$$

То обстоятельство, что скалярное произведение $(\boldsymbol{e}_1\boldsymbol{e}_2)$ входит в (108,12) только для когерентного рассеяния, мы учтем, если возьмем от (108,13) матричный элемент перехода из начального состояния в конечное. Этот матричный элемент в силу ортогональности соответствующих волновых функций будет отличен от нуля только при условии, что начальное состояние атома совпадает с конечным

$$\delta_{21}(\boldsymbol{e}_1\boldsymbol{e}_2) = \frac{i}{\hbar}\left[(\boldsymbol{e}_1\hat{\boldsymbol{p}})(\boldsymbol{e}_2\boldsymbol{r}) - (\boldsymbol{e}_2\boldsymbol{r})(\boldsymbol{e}_1\hat{\boldsymbol{p}})\right]_{21} =$$
$$= \frac{i}{\hbar}\sum_i \left((\boldsymbol{e}_1\hat{\boldsymbol{p}})_{2i}(\boldsymbol{e}_2\boldsymbol{r})_{i1} - (\boldsymbol{e}_2\boldsymbol{r})_{2i}(\boldsymbol{e}_1\hat{\boldsymbol{p}})_{i1}\right). \qquad (108,14)$$

Полученное выражение подставим в (108,12). Матричные элементы импульса, согласно (49,5), выражаются через матричные элементы координаты

$$(\boldsymbol{p})_{21} = \frac{i}{\hbar} m (E_2 - E_1)(\boldsymbol{r})_{21}. \qquad (108,15)$$

Складывая в (108,12) соответствующие матричные элементы в квадратных скобках и учитывая закон сохранения энергии (108,1), получаем следующее выражение для квадратной скобки, входящей в (108,12):

$$[\ldots] = \frac{m}{\hbar}\sum_i \left(\frac{\omega_2 (E_i - E_1)(\boldsymbol{e}_2\boldsymbol{r})_{2i}(\boldsymbol{e}_1\boldsymbol{r})_{i1}}{E_1 - E_i + \hbar\omega_1} + \frac{\omega_2 (E_2 - E_i)(\boldsymbol{e}_1\boldsymbol{r})_{2i}(\boldsymbol{e}_2\boldsymbol{r})_{i1}}{E_1 - E_i - \hbar\omega_2}\right). \qquad (108,16)$$

Это выражение можно упростить, если прибавить к нему следующее, равное нулю, слагаемое:

$$\frac{m\omega_2}{\hbar}\left[(\boldsymbol{e}_1\boldsymbol{r})(\boldsymbol{e}_2\boldsymbol{r}) - (\boldsymbol{e}_2\boldsymbol{r})(\boldsymbol{e}_1\boldsymbol{r})\right]_{21} = \frac{m\omega_2}{\hbar}\sum_i \left((\boldsymbol{e}_2\boldsymbol{r})_{2i}(\boldsymbol{e}_1\boldsymbol{r})_{i1} - (\boldsymbol{e}_1\boldsymbol{r})_{2i}(\boldsymbol{e}_2\boldsymbol{r})_{i1}\right).$$

---

[1]) См. цитированную монографию А. И. Ахиезера и В. Б. Берестецкого, стр. 385.

Тогда получаем:

$$[\ldots] = m\omega_1\omega_2 \sum_i \left( \frac{(\boldsymbol{e}_2\boldsymbol{r})_{2i}(\boldsymbol{e}_1\boldsymbol{r})_{i1}}{E_1 - E_i + \hbar\omega_1} + \frac{(\boldsymbol{e}_1\boldsymbol{r})_{2i}(\boldsymbol{e}_2\boldsymbol{r})_{i1}}{E_1 - E_i - \hbar\omega_2} \right). \qquad (108,17)$$

Подставляя (108,17) в (108,12), находим окончательное выражение для дифференциального эффективного сечения рассеяния

$$d\sigma = \frac{e^4}{c^4}\omega_1\omega_2^3 \left| \sum_i \left( \frac{(\boldsymbol{e}_2\boldsymbol{r})_{2i}(\boldsymbol{e}_1\boldsymbol{r})_{i1}}{E_1 - E_i + \hbar\omega_1} + \frac{(\boldsymbol{e}_1\boldsymbol{r})_{2i}(\boldsymbol{e}_2\boldsymbol{r})_{i1}}{E_1 - E_i - \hbar\omega_2} \right) \right|^2 d\Omega. \qquad (108,18)$$

Замечательной особенностью полученных формул является то, что при когерентном рассеянии они совпадают с классической формулой § 36 ч. I. Формула (108,18) широко применяется на практике, поскольку изучение комбинационного рассеяния оказалось весьма эффективным методом исследования уровней энергии и других свойств сложных молекул.

Отметим также, что из полученных соотношений можно выразить матричные элементы атомного дипольного момента, индуцируемого светом. В свою очередь, как это было показано в § 34 ч. IV, в разреженном газе легко найти связь между диэлектрической проницаемостью и индуцируемым дипольным моментом. Поэтому формула (108,18) является основной для квантовомеханического расчета диэлектрической проницаемости $\varepsilon$ и соответственно показателя преломления $n = \sqrt{\varepsilon}$. В частности, при когерентном рассеянии для величины $n^2$ получается следующее выражение:

$$n^2 = 1 + \frac{4\pi e^2 N}{m} \sum_i \frac{f_i}{\omega_{i1}^2 - \omega^2}, \qquad (108,19)$$

где величина $f_i = \frac{2m\omega_{i1}}{\hbar} |x_{i1}|^2$ носит название силы осциллятора, $\hbar\omega_{i1} = E_i - E_1$, $N$ — число атомов в единице объема. За ось $x$ мы выбрали направление поляризации фотонов. Для сил осцилляторов $f_i$ справедливо соотношение [1])

$$\sum_i f_i = 1.$$

Как отмечалось выше, полученные выражения теряют смысл вблизи резонанса. Исследование этого явления, носящего название резонансной флуоресценции, невозможно без введения понятия ширины линии, которому будет посвящен следующий параграф. Там же будут приведены формулы теории рассеяния с учетом ширины линии.

---

[1]) См., например, Г. Бете и Э. Солпитер, Квантовая механика атомов с одним и двумя электронами, Физматгиз, 1960, стр. 401.

## § 109. Теория естественной ширины линий

В § 103—105 была найдена полная вероятность излучения фотона атомной системой. Более точное исследование соответствующих уравнений дает возможность найти и распределение интенсивности излучения по частоте, т. е. определить форму спектральной линии излучения. Напомним, что подобная задача была решена и в рамках классических представлений (см. ч. I). При этом для получения естественной формы линии нужно было учесть затухание амплитуды радиационного осциллятора.

Хотя взаимодействие заряженных частиц с электромагнитным полем является слабым, мы не можем при рассмотрении формы линии ограничиться обычным приближением теории возмущений. Действительно, получение формы линии связано с необходимостью учесть затухание начального состояния атомной системы. Такое затухание проявляется за достаточно большое время $t$ и, естественно, не может быть учтено методами теории возмущений (см. § 56).

Будем исходить из общей системы уравнений (55,5) для амплитуд $c_m$ невозмущенных состояний (атом и поле излучения). Амплитуду начального состояния системы обозначим через $\varphi'(t)$. В этом состоянии фотонов нет, а атом находится в возбужденном состоянии с энергией $E_2$. В системе уравнений (55,5) достаточно учесть лишь такие состояния, энергия которых приближенно совпадает с энергией исходного состояния. Именно эти состояния играют основную роль. Будем считать для простоты, что состояние с энергией $E_2$ является первым возбужденным состоянием атома, а энергия основного состояния равна $E_1$:

$$E_2 - E_1 = \hbar\omega_0.$$

При излучении испускается фотон с частотой $\omega$, близкой к частоте $\omega_0$. Амплитуду состояния, возникающего при переходе $2 \to 1$ (атом переходит в основное состояние и испускается фотон с волновым вектором $\boldsymbol{k}_\lambda$, частотой $\omega_\lambda$, поляризацией $\boldsymbol{e}_\lambda$), обозначим через $f'_\lambda(t)$.

Система уравнений (55,5) в данном случае будет иметь вид

$$\begin{aligned} i\hbar\dot{f}'_\lambda(t) &= \langle 1,\ 1_\lambda \,|\, H' \,|\, 2,\ 0\rangle \exp[-i(\omega_\lambda - \omega_0)t]\,\varphi'(t), \\ i\hbar\dot{\varphi}'(t) &= \sum_\lambda \langle 2,\ 0 \,|\, H' \,|\, 1,\ 1_\lambda\rangle \exp[i(\omega_\lambda - \omega_0)t]\, f'_\lambda(t). \end{aligned} \qquad (109,1)$$

Из начальных условий следует

$$f'_\lambda(0) = 0, \qquad \varphi'(0) = 1.$$

Введем обозначения

$$f_\lambda(t)=f'_\lambda(t)\exp(-i\omega_\lambda t),\qquad \langle 1,\,1_\lambda\,|\,H'\,|\,2,\,0\rangle = H'_{12},$$
$$\varphi(t)=\varphi'(t)\exp(-i\omega_0 t),\qquad \langle 2,\,0\,|\,H'\,|\,1,\,1_\lambda\rangle = H'_{21}=H'^{*}_{12}. \tag{109,2}$$

Гамильтониан взаимодействия $\hat{H}'$ заряженных частиц с электромагнитным полем дается выражением (102,2). Форма линии определяется величиной $|f'_\lambda(t)|^2=|f_\lambda(t)|^2$ при $t\to\infty$.

Подставляя выражение (109,2) в (109,1), получаем систему уравнений для амплитуд $f_\lambda(t)$ и $\varphi(t)$:

$$i\hbar\dot{f}_\lambda(t)=H'_{12}\varphi(t)+\hbar\omega_\lambda f_\lambda(t),$$
$$i\hbar\dot{\varphi}_\lambda(t)=\hbar\omega_0\varphi(t)+\sum_\lambda H'^{*}_{12}f_\lambda(t). \tag{109,3}$$

Систему уравнений (109,3) удобно решать с помощью преобразования Лапласа. Амплитуды в представлении Лапласа обозначим через $f_\lambda(p)$:

$$f_\lambda(p)=\int_0^\infty f_\lambda(t)\exp(-pt)\,dt,\qquad f_\lambda(t)=\frac{1}{2\pi i}\int_{-i\infty+\delta}^{i\infty+\delta} f_\lambda(p)\exp(pt)\,dp. \tag{109,4}$$

С учетом начальных условий, имеем

$$ipf_\lambda(p)=\frac{1}{\hbar}H'_{12}\varphi(p)+\omega_\lambda f_\lambda(p),\quad ip\varphi(p)=i+\omega_0\varphi(p)+\frac{1}{\hbar}\sum_\lambda H'^{*}_{12}f_\lambda(p). \tag{109,5}$$

Исключая из этой системы амплитуду $\varphi(p)$, получим уравнение для функции $f_\lambda(p)$:

$$(ip-\omega_\lambda)(ip-\omega_0)f_\lambda(p)=\frac{i}{\hbar}H'_{12}+\frac{H'_{12}}{\hbar^2}\sum_\lambda H'^{*}_{12}f_\lambda(p). \tag{109,6}$$

Умножая левую и правую части уравнения на функцию $H'^{*}_{12}$ и суммируя по $\lambda$, находим выражение для суммы $\frac{1}{\hbar}\sum_\lambda H'^{*}_{12}f_\lambda(p)$:

$$\frac{1}{\hbar}\sum_\lambda H'^{*}_{12}f_\lambda(p)=\frac{1}{2}\,\frac{\gamma}{ip-\omega_0+\frac{i\gamma}{2}}, \tag{109,7}$$

где $\gamma$ определяется соотношением

$$\frac{1}{\hbar^2}\sum_\lambda\frac{|H'_{12}|^2}{ip-\omega_\lambda}=-i\,\frac{\gamma}{2}. \tag{109,8}$$

Переходим от дискретного к непрерывному распределению частот и заменяем суммирование интегрированием. Знаменатель левой части выражения (109,8) содержит бесконечно малую

мнимую положительную добавку. Интегрирование по частоте $\omega$ сводится к взятию интеграла в смысле главного значения и полувычету в точке $\omega_\lambda = ip$,

$$\int \frac{F(\omega)\,d\omega}{ip-\omega} = P\int \frac{F(\omega)\,d\omega}{ip-\omega} - i\pi F(ip), \tag{109,9}$$

где $F$ — произвольная функция.

Интегралом, взятым в смысле главного значения, мы пренебрегаем. (Он дает малый действительный сдвиг спектра частот излучения.) Так как при интегрировании по переменной Лапласа $p$ основной вклад вносит область, где $ip \approx \omega_0$, мы можем при нахождении величины $\gamma$ брать вычет сразу в этой точке. Окончательно имеем

$$\gamma = \frac{2\pi}{\hbar^2}\sum\int d\Omega\,|H'_{12}|^2\,\omega_0^2 V/(2\pi c)^3. \tag{109,10}$$

В правой части проводится суммирование по поляризациям и интегрирование по направлениям вектора $\boldsymbol{k}$ испущенного фотона. Из сравнения (109,10) с выражениями, полученными в § 103, следует, что величина $\gamma$ является полной вероятностью излучения в единицу времени фотона атомом.

Подставляя выражение (109,7) в (109,6), находим амплитуду $f_\lambda(p)$:

$$f_\lambda(p) = \frac{iH'_{12}}{\hbar\,(ip-\omega_0+i\gamma/2)\,(ip-\omega_\lambda)}. \tag{109,11}$$

По изображению (109,11) находим оригинал, функцию $f_\lambda(t)$ [см. (109,4)]. Замыкая контур интегрирования в левой полуплоскости комплексного переменного $p$ и определяя вычеты, находим

$$f_\lambda(t) = \frac{H'_{12}\exp(-i\omega_\lambda t)}{\hbar\,(\omega_\lambda-\omega_0+i\gamma/2)}\left[\exp\left(i(\omega_\lambda-\omega_0)t-\frac{\gamma}{2}t\right)-1\right]. \tag{109,12}$$

Выражение $|f_\lambda(t)|^2$, взятое по истечении достаточно большого времени $t \gg 1/\gamma$, определяет вероятность испускания атомом фотона с данной поляризацией и данным волновым вектором $\boldsymbol{k}_\lambda$, т. е. определяет форму линии излучения

$$|f_\lambda(\infty)|^2 = \frac{|H'_{12}|^2}{\hbar^2}\,\frac{1}{(\omega_\lambda-\omega_0)^2+\gamma^2/4}. \tag{109,13}$$

Интенсивность излучения атомом фотона данной частоты $\omega$, $I(\omega)$ получается из (109,13) умножением $|f_\lambda(\infty)|^2$ на $\hbar\omega\rho(\omega)$ [см. (103,4)] и суммированием и интегрированием по поляризациям и направлениям испущенного фотона. Учитывая (109,10),

имеем

$$I(\omega)\,d\omega = \frac{\gamma}{2\pi}\,\frac{\hbar\omega\,d\omega}{(\omega-\omega_0)^2+\gamma^2/4}. \qquad (109{,}14)$$

Распределение интенсивности излучения имеет дисперсионный характер, причем ширина распределения $\gamma$ равна полной вероятности излучения в единицу времени. Полученная связь ширины распределения с вероятностью перехода находится в соответствии с общим соотношением неопределенности Гейзенберга для времени и энергии $\Delta E\,\Delta t \gtrsim \hbar$ (см. § 34). Здесь $\Delta E$ — неопределенность энергии возбужденного состояния, $\Delta E \sim \hbar\Delta\omega$, $\Delta\omega$ — ширина распределения и $\Delta t$ — среднее время жизни атома в возбужденном состоянии, причем $\Delta t \sim 1/\gamma$, так как излучение происходит за время порядка $1/\gamma$. Отсюда следует, что $\Delta\omega \sim \gamma$, в соответствии с полученным результатом.

В том случае, когда переход происходит не между первым и основным уровнем, а между произвольными $i$-м и $k$-м уровнями, ширина линии перехода $\gamma_{ik}$ равна сумме ширин $\gamma_i$ и $\gamma_k$ уровней

$$\gamma_{ik} = \gamma_i + \gamma_k. \qquad (109{,}15)$$

Каждая из ширин уровней $\gamma_i$ и $\gamma_k$ равна сумме вероятностей перехода с данного уровня на все ниже лежащие уровни.

Рассмотренная ширина носит название «естественной», поскольку она обусловлена самим процессом излучения, реакцией излучения. Помимо этого существуют и другие механизмы уширения спектральных линий, приводящие обычно к более заметным эффектам. Так, например, в газовой системе существенным является ударное и доплеровское уширение[1]). Ударное уширение обусловлено столкновениями между молекулами. Действительно, столкновение прерывает процесс излучения. Поэтому, если $\tau$ — время жизни атома по отношению к столкновениям (среднее время между столкновениями), то, как следует из соотношения неопределенности для времени и энергии, ширина линии порядка $\frac{1}{\tau}$.

При учете ширины линии результаты, полученные в предыдущем параграфе, могут быть распространены на области вблизи резонанса, когда

$$\hbar\omega \approx E_n - E_1,$$

где $E_n$ — энергия одного из атомных уровней. В этом случае основной вклад при суммировании вносят лишь состояния с «резонансной» энергией $E_n$. Так, для дифференциального эффективного сечения когерентного рассеяния вместо (108,18)

---

[1]) Подробно этот вопрос рассмотрен, например, в книге И. И. Собельмана, Введение в теорию атомных спектров, Физматгиз, 1963.

имеем

$$d\sigma = \frac{e^4\omega^4}{c^4} \frac{\left| \sum_i (\mathbf{e}_2\mathbf{r})_{2i} (\mathbf{e}_1\mathbf{r})_{i1} \right|^2}{(E_1 - E_n + \hbar\omega)^2 + \Gamma_n^2/4} d\Omega, \qquad (109,16)$$

где $\Gamma_n$ — полная ширина $n$-го уровня. Суммирование ведется по всем состояниям с энергией $E_n$.

Выполняя суммирование и усредняя по начальным состояниям системы и суммируя по конечным, получаем

$$\sigma = \pi\lambda\!\!\!^{-2} \frac{2j_n + 1}{2j_1 + 1} \frac{\gamma_n^2}{(E_1 - E_n + \hbar\omega)^2 + \Gamma_n^2/4}, \qquad (109,17)$$

где $\gamma_n$ — естественная ширина $n$-го уровня, $\lambda\!\!\!^- = c/\omega$, $j_1$, $j_n$ — полные моменты начального и $n$-го — атомных состояний. Сечение достигает максимальной величины, равной $4\pi\lambda\!\!\!^{-2}\frac{2j_n+1}{2j_1+1}$ при точном резонансе и $\gamma_n = \Gamma_n$.

ГЛАВА XIII

# РЕЛЯТИВИСТСКАЯ КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА

## § 110. Релятивистское волновое уравнение для частицы со спином нуль

До сих пор мы ограничивались изучением свойств микрочастиц, движущихся со скоростями, малыми по сравнению со скоростью света.

Действительно, при получении уравнения Шредингера мы писали нерелятивистскую функцию Гамильтона частицы во внешнем потенциальном поле

$$H = \frac{\boldsymbol{p}^2}{2m} + U(\boldsymbol{r})$$

и заменяли в ней соответствующие величины на операторы. Для получения релятивистской теории следует пользоваться той же схемой, которая была развита в § 27. Именно, для построения волнового уравнения следует использовать релятивистское выражение для функции Гамильтона. Для общности мы сразу будем считать, что частица движется во внешнем электромагнитном поле. Тогда ее функция Гамильтона имеет вид (23,17) ч. II. Производя в ней замену соответствующих величин на операторы, т. е. $H \to i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$, $\boldsymbol{p} \to -i\hbar\nabla$, получаем уравнение

$$\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - e\varphi\right)^2 \psi = c^2\left(-i\hbar\nabla - \frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)^2 \psi + m^2c^4\psi. \qquad (110,1)$$

Уравнение (110,1) носит название уравнения Клейна — Гордона — Фока. Релятивистская инвариантность этого уравнения очевидна. Уравнение Клейна — Гордона — Фока представляет собой волновое уравнение второго порядка.

Поскольку релятивистская функция Гамильтона в пределе переходит в функцию Гамильтона классической механики, то естественно предположить, что при $c \to \infty$ уравнение Клейна — Гордона — Фока перейдет в уравнение Шредингера. Покажем это.

Начала отсчетов для энергии в нерелятивистской теории и теории относительности различаются на $mc^2$, поэтому удобно ввести преобразование волновой функции $\psi$ с помощью следующего соотношения:

$$\psi(x,\ t) = \psi'(x,\ t)\,e^{-\frac{imc^2t}{\hbar}}.$$

Подставляя в (110,1) и вычисляя производные по времени, получаем

$$2i\hbar mc^2\frac{\partial\psi'}{\partial t} - \hbar^2\frac{\partial^2\psi'}{\partial t^2} - 2e\varphi\left[mc^2\psi' + i\hbar\frac{\partial\psi'}{\partial t}\right] + \\ + e^2\varphi^2\psi' = c^2\left(\hat{p} - \frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)^2\psi'. \quad (110,2)$$

Оставляя в этом уравнении только члены, пропорциональные $c^2$, приходим, после деления обеих частей уравнения на $2mc^2$ к обычному уравнению Шредингера

$$i\hbar\frac{\partial\psi'}{\partial t} = \frac{\left(\hat{p} - \frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)^2}{2m}\psi' + e\varphi\psi'. \quad (110,3)$$

Мы показали, таким образом, что уравнение Клейна — Гордона — Фока в нерелятивистском пределе переходит в уравнение Шредингера.

Уравнение (110,1), как и уравнение Шредингера, определяет развитие процесса во времени. Состояние частицы по-прежнему характеризуется волновой функцией $\psi(x, y, z, t)$. Эта функция зависит от координат $x$, $y$, $z$, $t$ и не содержит спиновых переменных. Поэтому заведомо ясно, что уравнение Клейна — Гордона — Фока определяет поведение частиц со спином нуль. Для описания частиц со спином, отличным от нуля, оно должно быть как-то видоизменено.

Поскольку уравнение Клейна — Гордона — Фока является релятивистски-инвариантным, то при преобразованиях Лоренца волновая функция может умножаться только на некоторый постоянный фазовый множитель. Из соображений нормировки следует, что этот множитель должен равняться $+1$ (но не $-1$, так как преобразование Лоренца является непрерывным). При пространственном отражении координат волновая функция $\psi$ может умножаться на $+1$ или $-1$. Иными словами, при воздействии оператора четности волновая функция может преобразовываться двумя способами:

$$\hat{I}\psi(x, y, z, t) = +\,\psi(-x,\ -y,\ -z,\ t),$$
$$\hat{I}\psi(x, y, z, t) = -\,\psi(-x,\ -y,\ -z,\ t).$$

Таким образом, волновая функция $\psi$ может быть или скаляром или псевдоскаляром. По этой причине уравнение Клейна — Гордона — Фока часто называют скалярным уравнением.

В качестве примера интегрирования уравнения (110,1) рассмотрим случай свободной частицы. При этом уравнение Клейна — Гордона — Фока может быть записано в форме

$$-\hbar^2 \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} = -c^2\hbar^2 \Delta\psi + m^2c^4\psi. \tag{110,4}$$

Решение уравнения (110,4) будем искать в виде

$$\psi = e^{-\frac{iEt}{\hbar}} \psi_1(x, y, z).$$

Тогда для функции $\psi_1$ находим

$$E^2\psi_1 = -c^2\hbar^2 \Delta\psi_1 + m^2c^4\psi_1.$$

Переписав последнее уравнение в виде

$$\Delta\psi_1 + \frac{E^2 - m^2c^4}{c^2\hbar^2} \psi_1 = 0, \tag{110,5}$$

легко найдем, что решением его служит плоская волна вида

$$\psi_1 = ae^{\frac{ipr}{\hbar}}.$$

Подставляя найденное значение для $\psi_1$ в (110,5), приходим к релятивистскому соотношению между энергией $E$ и импульсом $p$ свободной частицы

$$E^2 = c^2p^2 + m^2c^4.$$

Это соотношение совпадает с обычной формулой для энергии в теории относительности.

## § 111. Плотность заряда и поток вероятности для частиц со спином нуль

Мы перейдем теперь к нахождению плотности заряда и потока вероятности для частиц, описываемых скалярным волновым уравнением (110,1). Вывод выражений для этих величин производится по той же схеме, что и для уравнения Шредингера. Именно, уравнение Клейна — Гордона — Фока

$$\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - e\varphi\right)^2 \psi - c^2\left(-i\hbar\nabla - \frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)^2 \psi - m^2c^4\psi = 0 \tag{111,1}$$

умножаем на сопряженную волновую функцию $\psi^*$.

Волновое уравнение, сопряженное к уравнению (111,1), умножим на волновую функцию $\psi$. Из первого уравнения вычтем

второе. В результате найдем:

$$-\hbar^2\left[\psi^*\frac{\partial^2\psi}{\partial t^2}-\psi\frac{\partial^2\psi^*}{\partial t^2}\right]-2i\hbar e\varphi\left(\psi^*\frac{\partial}{\partial t}\psi+\psi\frac{\partial}{\partial t}\psi^*\right)-$$
$$-\hbar^2c^2\left[\psi\,\Delta\psi^*-\psi^*\,\Delta\psi\right]-i\hbar ec\left[\psi^*(\nabla\boldsymbol{A}+\boldsymbol{A}\nabla)\psi+\psi(\nabla\boldsymbol{A}+\boldsymbol{A}\nabla)\psi^*\right]=0. \tag{111,2}$$

Первое выражение, стоящее в скобках, легко преобразуется к виду

$$\psi^*\frac{\partial^2\psi}{\partial t^2}-\psi\frac{\partial^2\psi^*}{\partial t^2}=\frac{\partial}{\partial t}\left[\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial t}-\psi\frac{\partial}{\partial t}\psi^*\right].$$

Вторая скобка есть просто производная по времени от произведения $\psi^*\psi$. С помощью векторного соотношения

$$\psi\,\Delta\psi^*=\psi\operatorname{div}\operatorname{grad}\psi^*=\operatorname{div}(\psi\operatorname{grad}\psi^*)-\operatorname{grad}\psi\operatorname{grad}\psi^*$$

находим, что

$$\psi\,\Delta\psi^*-\psi^*\,\Delta\psi=\operatorname{div}\left[\psi\operatorname{grad}\psi^*-\psi^*\operatorname{grad}\psi\right].$$

Наконец, последнее выражение в скобках формулы (111,2) с помощью соотношения

$$\psi^*(\nabla\boldsymbol{A})\psi=\psi^*\operatorname{div}(\psi\boldsymbol{A})=\operatorname{div}(\psi^*\psi\boldsymbol{A})-\psi\boldsymbol{A}\operatorname{grad}\psi^*$$

приводится к виду

$$\psi^*(\nabla\boldsymbol{A}+\boldsymbol{A}\nabla)\psi+\psi(\nabla\boldsymbol{A}+\boldsymbol{A}\nabla)\psi^*=2\operatorname{div}(\psi\psi^*\boldsymbol{A}).$$

Если умножить все члены уравнения (111,2) на величину $\frac{e}{2i\hbar mc^2}$ и использовать указанные преобразования, то уравнение (111,2) запишется в виде

$$\operatorname{div}\boldsymbol{j}+\frac{\partial\rho}{\partial t}=0,$$

где плотность заряда $\rho$ равна

$$\rho=\frac{e\hbar}{2imc^2}\left[\psi\frac{\partial\psi^*}{\partial t}-\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial t}\right]-\frac{e^2}{mc^2}\varphi\psi^*\psi. \tag{111,3}$$

Для плотности тока имеем при этом выражение

$$\boldsymbol{j}=\frac{i\hbar e}{2m}\left[\psi\operatorname{grad}\psi^*-\psi^*\operatorname{grad}\psi\right]-\frac{e^2}{mc^2}\psi\psi^*\boldsymbol{A}. \tag{111,4}$$

Остановимся на смысле полученных результатов. В нерелятивистской теории плотность заряда $\rho$ можно записать в виде

$$\rho(x,\ y,\ z,\ t)=eW(x,\ y,\ z,\ t),$$

где $W(x,y,z,t)$ — есть плотность вероятности. Последняя по своему существу является положительной величиной. Соотношение (111,3), очевидно, не может быть истолковано подобным образом. Выражение для $\rho$ может быть сделано отрицательным

соответствующим подбором функции $\psi$ в начальный момент времени.

Действительно, поскольку уравнение Клейна — Гордона — Фока является уравнением второго порядка по времени, в начальный момент времени могут быть заданы произвольные значения самой $\psi$-функции и ее производной по времени. Выбирая различные $\psi$ и $\frac{\partial\psi}{\partial t}$, можно прийти как к положительным, так и отрицательным значениям величины $\rho$.

Покажем теперь, что величина $\rho/e$ действительно имеет своим нерелятивистским пределом произведение $\psi^*\psi$. Пусть для производной волновой функции $\psi$ по времени выполняется соотношение

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = E\psi.$$

В таком случае выражение для плотности заряда $\rho$ может быть записано в виде

$$\rho = \frac{eE}{mc^2}\psi^*\psi - \frac{e^2\varphi}{mc^2}\psi^*\psi.$$

Если из энергии $E$ выделить энергию покоя, т. е. положить $E = mc^2 + E'$, то в этом случае легко получаем

$$\frac{\rho}{e} = \psi^*\psi\left[1 + \frac{E' - e\varphi}{mc^2}\right].$$

Если величина $E' - e\varphi \ll mc^2$, то мы имеем правильное выражение для нерелятивистского предела величины $\rho/e$. Мы видим, что в случае уравнения Клейна — Гордона — Фока нельзя ввести положительно определенную плотность вероятности. Это обстоятельство послужило причиной того, что в течение длительного времени уравнение Клейна — Гордона — Фока не применялось к реальным объектам.

## § 112. Понятие о поле ядерных сил

Позднее уравнению Клейна — Гордона — Фока была придана новая, совершенно иная физическая трактовка.

Мы знаем уже, что помимо электрических взаимодействий в природе реализуются и другие виды взаимодействий. В частности, такими взаимодействиями, не зависящими от электрического заряда $e$, являются сильные ядерные взаимодействия. Казалось естественным допустить, что ядерное взаимодействие можно связать с наличием у нуклонов особого нуклонного заряда $g$. При этом ядерное взаимодействие можно попытаться описать по аналогии с взаимодействием электрических зарядов, введя представление о поле ядерных сил. Это поле должно опи-

сываться некоторым потенциалом, подобным потенциалу $\varphi$ электрического поля. Была сделана попытка отказаться от трактовки уравнения Клейна — Гордона — Фока как уравнения для волновой функции одной частицы. Вместо этого функцию $\psi$ было предложено рассматривать как потенциал ядерного поля, создаваемого нуклонами. Подобно тому как фотоны являются квантовыми частицами, отвечающими электромагнитному полю, так и ядерному полю отвечают $\pi$-мезоны.

В § 67 мы останавливались уже на наглядной трактовке обмена $\pi$-мезонами и фотонами как источника соответственно сильного нуклонного и электрического взаимодействия.

Проводя эту аналогию дальше, мы можем перейти к написанию уравнения для потенциала ядерного поля. В качестве такого уравнения возьмем уравнение Клейна — Гордона — Фока в виде

$$\Delta\psi - \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2\psi}{\partial t^2} - \varkappa^2\psi = 0, \qquad (112,1)$$

$$\varkappa^2 = \frac{m^2c^2}{\hbar^2},$$

где $m$ — масса $\pi$ — мезона.

Мы не будем рассматривать квантовой теории ядерных сил, в которой мезоны являются элементарными возбуждениями некоторого поля, подобно фотонам в квантовой теории электромагнитного поля.

Поскольку нас интересует лишь качественная сторона дела, мы проведем рассуждения по аналогии с классической теорией электростатического поля. Считая ядерное поле не зависящим от времени, напишем для его потенциала $\psi$ уравнение

$$\Delta\psi - \varkappa^2\psi = 0. \qquad (112,2)$$

Это уравнение является некоторым аналогом уравнения электростатического поля и переходит в последнее при $m \to 0$ (см. ниже). При наличии точечных зарядов, как известно, уравнение электростатического поля имеет вид

$$\Delta\varphi = -4\pi e\delta(\boldsymbol{r}).$$

Поэтому при наличии нуклона в точке $\boldsymbol{r} = 0$ естественно придать уравнению (112,2) вид

$$\Delta\psi - \varkappa^2\psi = -4\pi g\delta(\boldsymbol{r}). \qquad (112,3)$$

Найдем решение этого уравнения, удовлетворяющее условию $\psi \to 0$ при $r \to \infty$.

Будем пытаться искать $\psi$ в виде

$$\psi(r) = \int \psi_k e^{i\boldsymbol{kr}}\, d\boldsymbol{k}.$$

Тогда, используя разложение дельта-функции в интеграл Фурье (см. приложение III т. I) и уравнение (112,3), находим для $\psi_k$ значение

$$\psi_k = \frac{g}{2\pi^2} \frac{1}{k^2 + \varkappa^2}.$$

Для поля $\psi$ получаем выражение, которое удобно записать в виде

$$\psi = \frac{g}{2\pi^2} \int \frac{e^{ikr\cos\theta} k^2\, dk}{k^2 + \varkappa^2} \sin\theta\, d\theta\, d\varphi.$$

Интегрирование по углам $\varphi$ и $\theta$ дает:

$$\psi = \frac{2g}{\pi r} \int_0^\infty \frac{k \sin kr}{k^2 + \varkappa^2}\, dk. \qquad (112,4)$$

При интегрировании этого выражения удобно ввести пределы интегрирования по $k$ от $(-\infty)$ до $(+\infty)$. Имеем в этом случае

$$\psi = \frac{g}{\pi i r} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{k e^{ikr}}{k^2 + \varkappa^2}\, dk.$$

Последний интеграл легко вычисляется при помощи теории вычетов.

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{k e^{ikr}}{k^2 + \varkappa^2}\, dk = 2\pi i \operatorname{Res}(k = i\varkappa) = \pi i e^{-\varkappa r},$$

откуда получаем выражение для потенциала ядерного поля

$$\psi = \frac{g}{r} e^{-\varkappa r}, \qquad (112,5)$$

именуемое потенциалом Юкавы.

Формула (112,5) показывает, что потенциал ядерных сил экспоненциально спадает с расстоянием. Эффективная область, в которой $\psi$ отлична от нуля, имеет размер

$$R \approx \frac{1}{\varkappa} = \frac{\hbar}{mc}.$$

Размер этой области по порядку величины совпадает с радиусом действия ядерных сил, определенным из опыта.

Для $m = 0$ потенциал $\psi$ переходит в потенциал электростатического поля

$$\psi = \frac{g}{r}.$$

Таким образом, величина $g$ действительно играет в потенциале Юкавы такую же роль, как заряд $e$ в электростатическом потенциале, и с полным правом может быть названа нуклонным зарядом. Следует подчеркнуть, что проведенный расчет отнюдь не может претендовать на количественную характеристику поля ядерных сил.

В действительности взаимодействие между нуклонами не носит статического характера. Для корректного рассмотрения процессов виртуального обмена $\pi$-мезонами необходимо проквантовать $\pi$-мезонное поле $\psi$, определяемое уравнением Клейна — Гордона — Фока. Это значит, что функцию $\psi$ и сопряженную ей функцию $\psi^+$ нужно рассматривать как квантовомеханические операторы в пространстве чисел заполнения. Эти операторы имеют отличные от нуля матричные элементы для процессов поглощения и испускания $\pi$-мезонов. Взаимодействие между нуклонами должно рассчитываться приемами, аналогичными тем, которые применяются в теории излучения. Мы видели в гл. XII, что расчетный аппарат теории излучения основан на применении теории возмущений. В качестве малого параметра фигурирует безразмерная константа взаимодействия $e^2/\hbar c$, составленная из заряда частицы и мировых постоянных $\hbar$ и $c$. Сильное ядерное взаимодействие также можно характеризовать константой взаимодействия $g^2/\hbar c$. Однако и в этом существенное отличие от электромагнитного взаимодействия, величина $g^2/\hbar c$ имеет порядок десяти. Таким образом, эффективность ядерного взаимодействия в тысячу с лишним раз выше электромагнитного. С этим связано наименование «сильное ядерное взаимодействие». Большая величина константы взаимодействия $g^2/\hbar c$, делает невозможным применение к расчету ядерных взаимодействий аппарата теории возмущений.

Это обстоятельство отражает изменение физической природы взаимодействия при переходе от заряженных частиц к нуклонам. Малость константы электромагнитного взаимодействия означала, что вероятность излучения в одном акте $N$ частиц была пропорциональна $\left(\frac{e^2}{\hbar c}\right)^N \ll 1$. Иными словами, вероятность испускания одного (актуального или виртуального) фотона существенно больше, чем вероятность одновременного испускания двух трех и т. д. фотонов.

Иначе дело обстоит в случае сильного ядерного взаимодействия. Вероятность одновременного испускания большого числа мезонов имеет тот же порядок величины, что и вероятность испускания одного мезона.

Поэтому каждый нуклон должен рассматриваться как частица, окруженная облаком виртуальных $\pi$-мезонов.

Правильность такой картины подтверждается явлениями множественного образования $\pi$-мезонов при столкновениях нуклонов большой энергии.

Таким образом, картина $\pi$-мезонного взаимодействия нуклонов оказывается гораздо более сложной, чем фотонного взаимодействия зарядов. Взаимодействие между двумя нуклонами непременно включает в себя множество $\pi$-мезонов и его рассмотрение должно быть основано на решении задачи многих тел. Последовательная количественная теория сильного ядерного взаимодействия до настоящего времени не разработана.

## § 113. Уравнение Дирака

В предыдущих параграфах было рассмотрено релятивистски инвариантное волновое уравнение, справедливое для частиц со спином 0. Мы видели при этом, что величина $\rho/e$, которую следовало бы трактовать как плотность вероятности, принимает как положительные, так и отрицательные значения.

Это обстоятельство, как видно из формулы (111,3), связано с тем, что значение $\rho/e$ определяется не только начальным значением $\psi$-функции, но и начальным значением производной $\frac{\partial\psi}{\partial t}$, задаваемым по произволу. Ясно, что для устранения этой трудности необходимо устранить возможность произвольного выбора производной $\frac{\partial\psi}{\partial t}$. Иными словами, необходимо, чтобы искомое релятивистское обобщение уравнения Шредингера содержало лишь первую производную по времени, как и само уравнение Шредингера. Поскольку, однако, во все релятивистские инвариантные выражения координаты и время должны входить одинаковым образом, то в релятивистское обобщение уравнения Шредингера должны входить первые производные по координатам.

Принцип суперпозиции требует, чтобы релятивистское волновое уравнение было линейным. На основе этих соображений для описания движения свободной частицы Дираком было сформулировано следующее уравнение:

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=\left(\beta'_x\frac{\partial}{\partial x}+\beta'_y\frac{\partial}{\partial y}+\beta'_z\frac{\partial}{\partial z}+\beta_0\right)\psi. \tag{113,1}$$

Выражение (113,1) представляет наиболее общую линейную форму, содержащую только первые производные от искомой функции. Это уравнение удобно переписать в несколько другой форме, переопределив величины $\beta'$. Именно, напишем его в форме

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=(\hat\beta_x\hat p_x+\hat\beta_y\hat p_y+\hat\beta_z\hat p_z+\hat\beta_0)\psi,$$

где операторы $\hat{p}_x$, $\hat{p}_y$, $\hat{p}_z$ — обычные операторы проекций импульса на оси координат, а операторы $\hat{\beta}_x$, $\hat{\beta}_y$, $\hat{\beta}_z$, $\hat{\beta}_0$ не содержат координат. Свойства этих операторов определим из дальнейших рассуждений. Вводя обозначение

$$\hat{H} = \hat{\beta}_x\hat{p}_x + \hat{\beta}_y\hat{p}_y + \hat{\beta}_z\hat{p}_z + \hat{\beta}_0,$$

можно записать уравнение (113,1) в форме

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \hat{H}\psi, \tag{113,2}$$

имеющей полное, хотя пока формальное, сходство с уравнением Шредингера.

Если предположить, что оператор $\hat{H}$ действительно представляет оператор Гамильтона, то между $\hat{H}$ и операторами импульса должна существовать такая же связь, как между энергией и импульсом в теории относительности, т. е.

$$\hat{H}^2 = c^2\left(\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2\right) + m^2c^4. \tag{113,3}$$

Последнее требование позволяет определить операторы $\hat{\beta}_x$, $\hat{\beta}_y$, $\hat{\beta}_z$, $\hat{\beta}_0$. Действительно, возводя оператор $\hat{H}$ в квадрат, мы получим:

$$\hat{H}^2 = \hat{\beta}_x^2\hat{p}_x^2 + \hat{\beta}_y^2\hat{p}_y^2 + \hat{\beta}_z^2\hat{p}_z^2 + \hat{\beta}_0^2 + \left(\hat{\beta}_x\hat{\beta}_y + \hat{\beta}_y\hat{\beta}_x\right)\hat{p}_x\hat{p}_y + \left(\hat{\beta}_x\hat{\beta}_z + \hat{\beta}_z\hat{\beta}_x\right)\hat{p}_x\hat{p}_z +$$
$$+ (\hat{\beta}_x\hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_0\hat{\beta}_x)\,\hat{p}_x + (\hat{\beta}_y\hat{\beta}_z + \hat{\beta}_z\hat{\beta}_y)\,\hat{p}_z\hat{p}_y + (\hat{\beta}_y\hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_0\hat{\beta}_y)\,\hat{p}_y +$$
$$+ (\hat{\beta}_z\hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_0\hat{\beta}_z)\,\hat{p}_z. \tag{113,4}$$

Оператор $\hat{H}^2$ будет иметь вид (113,3), если выполняются соотношения

$$\hat{\beta}_x^2 = \hat{\beta}_y^2 = \hat{\beta}_z^2 = c^2,$$
$$\hat{\beta}_0^2 = m^2c^4,$$
$$\hat{\beta}_i\hat{\beta}_k + \hat{\beta}_k\hat{\beta}_i = 0, \qquad i \neq k, \qquad \hat{\beta}_i\hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_0\hat{\beta}_i = 0.$$

Здесь $i$ принимает значения $x$, $y$, $z$.

Обычно вместо операторов $\beta_i$ вводят операторы $\alpha_i$, которые отличаются от них постоянными множителями:

$$\hat{\beta}_x = c\alpha_x; \quad \hat{\beta}_y = c\alpha_y; \quad \hat{\beta}_z = c\alpha_z; \quad \hat{\beta}_0 = mc^2\beta;$$

для операторов $\alpha$ и $\beta$ имеют место очевидные равенства

$$\alpha_x^2 = \alpha_y^2 = \alpha_z^2 = \beta^2 = 1, \qquad \alpha_i\beta + \beta\alpha_i = 0,$$
$$\alpha_i\alpha_k + \alpha_k\alpha_i = 0 \quad \text{при} \quad i \neq k. \tag{113,5}$$

С помощью введенных операторов уравнение (113,1) может быть записано в виде

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=[c(\alpha_x\hat{p}_x+\alpha_y\hat{p}_y+\alpha_z\hat{p}_z)+mc^2\beta]\psi. \tag{113,6}$$

Последнее уравнение называется уравнением Дирака.

Если ввести векторный оператор равенством

$$\boldsymbol{\alpha}=\alpha_x\boldsymbol{i}+\alpha_y\boldsymbol{j}+\alpha_z\boldsymbol{k},$$

то уравнение Дирака запишется в еще более компактном виде

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=\hat{H}\psi,$$

$$\hat{H}=c\boldsymbol{\alpha}\hat{\boldsymbol{p}}+mc^2\beta. \tag{113,7}$$

Перейдем теперь к нахождению явного вида операторов $\alpha_x$, $\alpha_y$, $\alpha_z$, $\beta$. Заметим прежде всего, что действия этих операторов не могут сводиться к умножению волновой функции на некоторые постоянные числа. С помощью операторов, сводящихся к постоянным числам, невозможно было бы удовлетворить соотношениям (113,5).

Попробуем искать операторы $\alpha_x$, $\alpha_y$, $\alpha_z$, $\beta$ в виде совокупности постоянных, вообще говоря комплексных чисел, т. е. в виде квадратных матриц вида

$$\alpha_x=\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n}\\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n}\\ \cdot & \cdot & & \cdot\\ \cdot & \cdot & & \cdot\\ \cdot & \cdot & & \cdot\\ a_{n1} & a_{n2} & \dots & a_{nn}\end{pmatrix}.$$

Определим прежде всего число $n$, которое будем считать одинаковым для матриц $\alpha$ и $\beta$. Для этого сопоставим матрицам $\alpha$ и $\beta$ детерминанты

$$\det\alpha_x=\begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n}\\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n}\\ \cdot & \cdot & & \cdot\\ \cdot & \cdot & & \cdot\\ \cdot & \cdot & & \cdot\\ a_{n1} & a_{n2} & \dots & a_{nn}\end{vmatrix}.$$

Прежде чем перейти к дальнейшему исследованию матриц, заметим, что для детерминанта от произведения матриц должно выполняться следующее соотношение:

$$\det\alpha_x\beta=\det\alpha_x\det\beta. \tag{113,8}$$

Из правил коммутаций следует далее

$$\alpha_x\beta = -\beta\alpha_x = -I\beta\alpha_x.$$

Здесь $I$ — единичная матрица. Используя затем соотношение (113,8), находим:

$$\det\alpha_x\beta = \det\alpha_x\det\beta = \det(-I)\det\beta\det\alpha_x.$$

Поскольку детерминанты являются обычными числами, отсюда получаем, что

$$\det(-I) = 1$$

и, следовательно,

$$(-1)^n = 1. \qquad (113,9)$$

Таким образом, число $n$ должно быть четным. Если бы число $n$ было равно двум, то искомые матрицы были бы двухрядными. С двухрядными матрицами мы встречались уже в § 59. Там было показано, что существуют четыре линейно независимые двухрядные числовые матрицы: три матрицы Паули и единичная матрица. Последняя коммутирует со всеми матрицами Паули и, следовательно, не удовлетворяет условиям антикоммутации (113,5). Наоборот, в случае четырехрядных матриц оказывается возможным построить матрицы с требуемыми свойствами. Именно, простой проверкой можно убедиться, что матрицы

$$\left.\begin{aligned}
\alpha_x &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad
\alpha_y = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & i & 0 \\ 0 & -i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \\
\alpha_z &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad
\beta = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}
\end{aligned}\right\} \qquad (113,10)$$

удовлетворяют всем сформулированным требованиям. Матрицы (113,10) можно записать в более сокращенном виде, используя матрицы Паули. Действительно, из определения (60,14), (60,15) и (113,10) ясны соотношения

$$\left.\begin{aligned}
\alpha_x &= \begin{pmatrix} 0 & \sigma_x \\ \sigma_x & 0 \end{pmatrix}, \quad \alpha_y = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_y \\ \sigma_y & 0 \end{pmatrix}, \\
\alpha_z &= \begin{pmatrix} 0 & \sigma_z \\ \sigma_z & 0 \end{pmatrix}, \quad \beta = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.
\end{aligned}\right\} \qquad (113,11)$$

Матрицы $\alpha$, $\beta$ являются эрмитовыми матрицами. Это можно установить простой проверкой. Если мы транспонируем матрицы и проведем комплексное сопряжение, то полученные матрицы совпадут с первоначальными. Поэтому для этих матриц можно написать $\alpha_x^+ = \alpha_x$; $\alpha_y^+ = \alpha_y$; $\alpha_z^+ = \alpha_z$; $\beta^+ = \beta$.

Если бы вместо четырехрядных матриц мы ввели матрицы более высокого ранга, то формальная схема теории не была бы нарушена. Однако, как будет ясно из дальнейшего, именно при введении четырехрядных матриц общее уравнение Дирака описывает свойства частиц со спином 1/2.

Приняв для $\alpha_x$, $\alpha_y$, $\alpha_z$, $\beta$ матричное выражение (113,10) в виде четырехрядных матриц, мы должны приписать волновой функции $\psi$ четыре компоненты. Действительно, только в этом случае четыре уравнения, на которые распадается общее выражение (113,7) при подстановке в него четырехрядных матриц, содержит четыре неизвестные функции. Четырехкомпонентную функцию $\psi$ (именуемую биспинором Дирака) можно записать в виде матрицы

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix}.$$

Выпишем эти уравнения в явном виде, пользуясь правилом умножения матриц (см. (45,6)):

$$i\hbar \frac{\partial \psi_1}{\partial t} = c(\hat{p}_x - i\hat{p}_y)\psi_4 + c\hat{p}_z\psi_3 + mc^2\psi_1,$$

$$i\hbar \frac{\partial \psi_2}{\partial t} = c(\hat{p}_x + i\hat{p}_y)\psi_3 - c\hat{p}_z\psi_4 + mc^2\psi_2,$$

$$i\hbar \frac{\partial \psi_3}{\partial t} = c(\hat{p}_x - i\hat{p}_y)\psi_2 + c\hat{p}_z\psi_1 - mc^2\psi_3,$$

$$i\hbar \frac{\partial \psi_4}{\partial t} = c(\hat{p}_x + i\hat{p}_y)\psi_1 - c\hat{p}_z\psi_2 - mc^2\psi_4.$$

Не представляет труда обобщить уравнение Дирака на случай движения заряженной частицы во внешнем электромагнитном поле. Именно, заменяя по обычной схеме оператор импульса $\hat{\boldsymbol{p}}$ на оператор $\hat{\boldsymbol{p}} - \frac{e}{c}\boldsymbol{A}$ и прибавляя к оператору $\hat{H}$ оператор $e\varphi$, где $\boldsymbol{A}$ и $\varphi$ — векторный и скалярный потенциалы электромагнитного поля, получим уравнение Дирака

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left[c\alpha\left(p - \frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right) + e\varphi + mc^2\beta\right]\psi. \qquad (113,12)$$

Преобразуем еще уравнение Дирака к другой более простой и симметричной форме.

Умножим уравнение Дирака (113,7) слева на оператор $\beta$

$$i\hbar\beta\frac{\partial\psi}{\partial t}=(c\beta\alpha p+mc^2\beta^2)\psi \qquad (113,13)$$

и введем следующую систему матриц:

$$\left.\begin{aligned}\gamma_1&=-i\beta\alpha_x,\\ \gamma_2&=-i\beta\alpha_y,\\ \gamma_3&=-i\beta\alpha_z,\\ \gamma_4&=+\beta.\end{aligned}\right\} \qquad (113,14)$$

Непосредственной проверкой легко убедиться в том, что матрицы $\gamma_i$ удовлетворяют тем же правилам коммутации, что и матрицы $\alpha$ и $\beta$, т. е. $\gamma_i\gamma_k+\gamma_k\gamma_i=2\delta_{ik}$. С помощью матриц $\gamma_i$ можно записать уравнение Дирака в виде

$$\sum_{i=1}^{3}\gamma_i\frac{\partial\psi}{\partial x_i}+\frac{mc}{\hbar}\psi+\frac{\gamma_4}{ic}\frac{\partial\psi}{\partial t}=0. \qquad (113,15)$$

Введем четвертую координату, $x_4=ict$, и запишем окончательно уравнение Дирака в весьма симметричной форме:

$$\gamma_\mu\frac{\partial\psi}{\partial x_\mu}+\frac{mc}{\hbar}\psi=0, \qquad (113,16)$$

где по $\mu$ производится суммирование. Вводя оператор $\hat{p}_\mu=\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x_\mu}$ и 4-потенциал $A_\mu$ (см. § 19 ч. III), можно представить (113,12) в виде

$$\left[\gamma_\mu\left(\hat{p}_\mu-\frac{e}{c}A_\mu\right)-imc\right]\psi=0. \qquad (113,17)$$

## § 114. Плотность вероятности и поток вероятности в теории Дирака

Покажем прежде всего, что трудность с интерпретацией плотности вероятности $\rho/e$, с которой мы столкнулись при обсуждении уравнения Клейна — Гордона — Фока, отсутствует в уравнении Дирака. Следуя обычной схеме, напишем, кроме уравнения Дирака

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=(-i\hbar c\alpha\nabla+mc^2\beta)\psi, \qquad (114,1)$$

сопряженное ему уравнение

$$-i\hbar\frac{\partial\psi^+}{\partial t}=i\hbar c\nabla\psi^+\alpha^++mc^2\psi^+\beta^+. \qquad (114,2)$$

При этом мы воспользовались правилом сопряжения произведения матриц

$$(ab)^+ = b^+ a^+.$$

Так как операторы $\alpha$ и $\beta$ эрмитовы, то $\alpha^+ = \alpha$, $\beta^+ = \beta$, и мы получаем

$$-i\hbar \frac{\partial \psi^+}{\partial t} = i\hbar c \nabla \psi^+ \alpha + mc^2 \psi^+ \beta. \qquad (114,3)$$

Уравнение (114,1) умножим на $\psi^+$ слева, а уравнение (114,3) на $\psi$ справа и вычтем из первого уравнения второе. Имеем:

$$i\hbar \left(\psi^+ \frac{\partial \psi}{\partial t} + \frac{\partial \psi^+}{\partial t} \psi\right) = -i\hbar c \left[\psi^+ \alpha \nabla \psi + \left(\nabla \psi^+ \alpha\right) \psi\right]. \qquad (114,4)$$

Круглая скобка в правой части уравнения (114,4) означает, что градиент действует только на функцию $\psi^+$. Выражение, стоящее в квадратных скобках, может быть легко преобразовано с помощью формулы

$$\psi^+ (\alpha \nabla) \psi + \left(\nabla \psi^+ \alpha\right) \psi = \psi^+ \operatorname{div} \alpha \psi + \left(\nabla \psi^+ \alpha\right) \psi = \operatorname{div} \psi^+ \alpha \psi.$$

Тогда уравнение (114,4) запишется в виде

$$\frac{\partial \psi^+ \psi}{\partial t} = -c \operatorname{div} \psi^+ \alpha \psi. \qquad (114,5)$$

Сравнивая полученное выражение с общей формулой (7,5), мы видим, что существенно положительная величина $\psi^+\psi = \overset{*}{\psi}_1 \psi_1 + \overset{*}{\psi}_2 \psi_2 + \overset{*}{\psi}_3 \psi_3 + \overset{*}{\psi}_4 \psi_4$ представляет собой плотность вероятности. Вектор, определяемый равенством $j = c\psi^+ \alpha \psi$, дает плотность потока вероятности для частицы с волновой функцией $\psi$.

Таким образом, как и в теории Шредингера, волновая функция допускает обычную вероятностную интерпретацию. Из линейности уравнения Дирака и вероятностной интерпретации функции $\psi$ вытекает, что остаются в силе основные положения квантовой механики: 1) интерпретация величины $|c_m(t)|^2$, где $c_m(t)$ — коэффициент разложения

$$\psi = \sum_m c_m \psi_m$$

и $\psi_m$ — собственная функция некоторого оператора, как вероятности измерения собственного значения, 2) определение среднего значения

$$\overline{L} = \int \psi^+ \hat{L} \psi \, dV.$$

Следовательно, остается справедливой и вся схема построения квантовой механики.

## § 115. Решение уравнения Дирака для свободной частицы

В качестве простейшего примера решения уравнения Дирака рассмотрим движение свободной частицы. Решение уравнения Дирака для свободно движущейся частицы

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=(c\boldsymbol{\alpha}\hat{\boldsymbol{p}}+mc^2\beta)\,\psi \qquad (115,1)$$

будем пытаться искать обычным путем. Подставляя волновую функцию $\psi=\psi_0e^{-\frac{iEt}{\hbar}}$ в (115,1), получаем уравнение для волновой функции $\psi_0$, не зависящей от времени:

$$E\psi_0=(c\boldsymbol{\alpha}\hat{\boldsymbol{p}}+mc^2\beta)\,\psi_0. \qquad (115,2)$$

Будем далее рассматривать состояния с определенным импульсом и пытаться искать решение уравнения (115,2) в виде плоской волны

$$\psi_0=ue^{\frac{i\boldsymbol{pr}}{\hbar}}.$$

Тогда для функции $u$ получим уравнение

$$Eu=(c\boldsymbol{\alpha p}+mc^2\beta)\,u. \qquad (115,3)$$

Подставим $u$ в виде

$$u=\begin{bmatrix}u_1\\u_2\\u_3\\u_4\end{bmatrix}=\begin{pmatrix}w\\w'\end{pmatrix},\qquad \left.\begin{aligned}w&=\begin{pmatrix}u_1\\u_2\end{pmatrix},\\ w'&=\begin{pmatrix}u_3\\u_4\end{pmatrix}.\end{aligned}\right\} \qquad (115,4)$$

Подставляя (115,4) в (115,3) и учитывая представления матриц $\alpha$ и $\beta$ (113,11), находим

$$Ew=c\boldsymbol{\sigma p}w'+mc^2w, \qquad (115,5)$$

$$Ew'=c\boldsymbol{\sigma p}w-mc^2w'. \qquad (115,6)$$

Каждая из функций $w$ и $w'$ имеет две компоненты.

Для того чтобы полученная система линейных уравнений имела решение, необходимо, чтобы ее детерминант обращался в нуль:

$$\begin{vmatrix}E-mc^2 & -c\boldsymbol{\sigma p}\\ -c\boldsymbol{\sigma p} & E+mc^2\end{vmatrix}=0. \qquad (115,7)$$

Раскрывая определитель, получаем

$$E^2-m^2c^4=+c^2(\boldsymbol{\sigma p})^2.$$

Выражение $(\sigma p)^2$ легко может быть преобразовано с помощью известных свойств матриц Паули. Согласно (60,17) имеем

$$(\sigma p)^2 = p^2. \tag{115,8}$$

Как и следовало ожидать, мы приходим к известному соотношению между энергией и импульсом частицы

$$E^2 = c^2 p^2 + m^2 c^4. \tag{115,9}$$

Энергия частицы может принимать как положительное, так и отрицательное значение. В теории относительности мы обсуждали уже этот вопрос и видели, что в рамках классической механики это обстоятельство не создавало никаких трудностей, поскольку область энергий шириной $2mc^2$ является запрещенной. Действительно, в классической механике все переменные изменяются непрерывно и частица имеет положительную либо отрицательную энергию. Непрерывный переход из одной области в другую невозможен.

В релятивистской квантовой механике нет каких-либо оснований отбросить отрицательный знак. Несколько ниже мы подробно обсудим смысл отрицательного знака энергии.

Выбирая в выражении для энергии знак плюс или знак минус, мы можем разрешить систему уравнений (115,5) и (115,6). При этом ввиду однородности системы уравнений одна из величин, либо $w$, либо $w'$, остается произвольной.

Пусть $w$ — величина произвольная. Тогда

$$w' = \frac{c\sigma p}{E + mc^2} w. \tag{115,10}$$

Если, наоборот, произвольной принимается величина $w'$, то имеем:

$$w = \frac{c\sigma p}{E - mc^2} w'. \tag{115,11}$$

Соответствующие волновые функции имеют вид (при этом направление вектора импульса принято для простоты за ось $z$):

$$u = \begin{pmatrix} A \\ B \\ \dfrac{cp_z A}{E + mc^2} \\ -\dfrac{cp_z B}{E + mc^2} \end{pmatrix}, \quad v = \begin{pmatrix} \dfrac{cp_z D}{E - mc^2} \\ \dfrac{cp_z F}{E - mc^2} \\ D \\ F \end{pmatrix}. \tag{115,12}$$

Здесь $A$, $B$, $D$, $F$ — произвольные постоянные. Характер найденных выражений становится более ясным, если перейти к нерелятивистскому пределу, положив $E \sim mc^2$ или $E \sim -mc^2$

соответственно. Тогда из (115,10) видно, что в первом случае

$$w' = \frac{c\sigma p}{mc^2} w \sim \frac{v}{c} w.$$

Спинор $w'$ меньше $w$ в отношении $v/c$, так что

$$u \approx \begin{pmatrix} A \\ B \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

При отрицательном значении энергии (115,11) дает

$$w \approx -\frac{c\sigma p w'}{2mc^2} \approx -\frac{v}{c} w'$$

и

$$v = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ D \\ F \end{pmatrix}.$$

Таким образом, при переходе к нерелятивистскому приближению две компоненты волновой функции оказываются малыми по сравнению с двумя другими компонентами. При этом для положительных энергий $w$ велико по сравнению с $w'$, при отрицательных — наоборот. Общее решение уравнения Дирака для движения свободной частицы можно написать в виде суперпозиции волновых функций типа (115,12), т. е. в виде интеграла Фурье вида

$$\psi(x, y, z, t) = \int u(A, B) e^{-\frac{iEt}{\hbar}} e^{\frac{ipr}{\hbar}} dp + \int v(D, F) e^{+\frac{i|E|t}{\hbar}} e^{\frac{ipr}{\hbar}} dp,$$

где

$$dp = dp_x dp_y dp_z.$$

Если в начальный момент $t = 0$ задана волновая функция

$$\psi(x, y, z, 0) = \int \varphi(p) e^{\frac{ipr}{\hbar}} dp; \quad \varphi(p) = \begin{pmatrix} \varphi_1(p) \\ \varphi_2(p) \\ \varphi_3(p) \\ \varphi_4(p) \end{pmatrix},$$

то через четыре произвольных коэффициента, входящих в $u$ и $v$, можно однозначно определить заданную совокупность величин $\varphi_1$, $\varphi_2$, $\varphi_3$ и $\varphi_4$.

Таким образом, совокупность двух волн, одна из которых отвечает положительной энергии, а вторая — отрицательной,

образуют полное решение уравнения Дирака. Совершенно ясно, что если бы частное решение, отвечающее отрицательной энергии, было отброшено и удержано только решение с положительной энергией, то найденная при этом система функций была неполной.

Начальные условия содержат четыре заданные величины, тогда как в $u$ входят только две неопределенные постоянные $A$ и $B$. Таким образом, независимо от других соображений необходимость учета решений с отрицательной энергией вытекает из общих основ квантовой механики.

В следующем параграфе мы вернемся к обсуждению тех фундаментальных выводов, которые были сделаны из существования решений уравнения Дирака, отвечающих отрицательной энергии частиц.

## § 116. Понятие о позитроне

Мы перейдем теперь к обсуждению формулы

$$E = \pm \sqrt{p^2c^2 + m^2c^4}. \tag{116,1}$$

Как указывалось выше, отрицательная энергия свободной частицы с точки зрения классической механики не имеет физического смысла.

В квантовой механике ситуация изменяется. Именно в квантовой механике возможны скачкообразные переходы из состояния с положительной энергией в состояние с отрицательной энергией. Иными словами, оба класса состояний уже не разделены непроходимым барьером. Мы уже видели, что исключение состояний с отрицательной энергией противоречит общим положениям квантовой механики, так как волновые функции состояний с положительной энергией не образуют полную систему функций.

С другой стороны, невозможно допустить существование частиц с отрицательной энергией. Подобные частицы обладали бы такими свойствами, которые принципиально отличаются от свойств всех наблюдавшихся в природе частиц. В виде примера можно указать на следующее: частица с отрицательной энергией $-|E_1|$ могла бы переходить в состояние с меньшей отрицательной энергией $-|E_2|$, $|E_2| > |E_1|$. При этом разность $|E_2| - |E_1|$ могла бы превращаться в полезную работу. Такой переход мог бы совершаться непрерывно, поскольку $|E_2|$ ничем не ограничено и частица с отрицательной энергией могла бы служить бесконечно большим источником работы.

Чтобы избежать трудностей, связанных с введением в теорию наблюдаемых частиц с отрицательной энергией, Дирак ввел понятие вакуума как такого состояния пространства, в котором

все состояния с отрицательной энергией заняты электронами, а все состояния с положительной энергией свободны. В каждом состоянии с отрицательной энергией, согласно принципу Паули, находится один электрон.

Предположим далее, что под влиянием внешних воздействий один из электронов удален из состояния с отрицательной энергией. Освободившееся состояние с отрицательной энергией проявляется как «нечто» с положительной энергией, так как для уничтожения такого состояния, т. е. для его заполнения необходимо добавить к нему электрон с отрицательной энергией. Таким образом, незаполненное состояние с отрицательной энергией следует трактовать как частицу, имеющую положительную энергию.

Следует заметить, что Дирак вначале ошибочно сопоставлял это состояние с протоном. Позднее было теоретически показано, что частица, соответствующая незаполненному состоянию с отрицательной энергией, должна иметь массу, равную массе электрона и, следовательно, она не может быть протоном.

Рассмотрим соображения Дирака о заполненном фоне отрицательных энергий более подробно. Пусть $N_\alpha^{(-)}(p)$ и $N_\alpha^{(+)}(p)$ означают числа электронов, находящихся соответственно в состояниях с отрицательной и положительной энергией и имеющих импульс $p$. Индекс $\alpha$ может принимать два значения в соответствии с направлением спина. Эти числа, в согласии с принципом Паули, могут принимать значения только 0 или 1. В состоянии вакуума (индекс $v$) мы имеем

$$N_{\alpha v}^{(-)}(p) = 1, \quad N_{\alpha v}^{(+)}(p) = 0$$

при всех значениях импульса.

Действительно, все состояния с отрицательной энергией при этом заняты, а все состояния с положительной — свободны. При этом энергия $E_v$ и заряд $q_v$ в вакууме определяется соотношениями

$$E_v = -\sum_{\alpha,\, p} E(p)\, N_{\alpha v}^{(-)}(p), \tag{116,2}$$

$$q_v = -|e| \sum_{\alpha,\, p} N_{\alpha v}^{(-)}(p). \tag{116,3}$$

Здесь $e$ — заряд электрона.

Так как импульс и энергия свободных частиц ничем не ограничены, значения $E_v$ и $q_v$ бесконечно велики. Однако согласно Дираку эти величины принципиально не наблюдаемы. Наблюдаемыми являются лишь такие величины, которые характеризуют отклонение от состояния вакуума.

Напишем, далее, полную энергию $E$ системы и заряд $q$ системы в том случае, когда в пространстве находятся электроны

в состояниях с положительной энергией, а в состояниях с отрицательной энергией имеются свободные места

$$E = \sum_{\alpha, p} \left[N_\alpha^+(p) - N_\alpha^{(-)}(p)\right] E(p), \tag{116,4}$$

$$q = -\sum_{\alpha, p} |e| \left[N_\alpha^+(p) + N_\alpha^{(-)}(p)\right]. \tag{116,5}$$

В соответствии со сказанным выше наблюдаемы лишь следующие разности:

$$E - E_v = \sum_{\alpha, p} \left[N_\alpha^+(p) + \left(N_{\alpha v}^{(-)}(p) - N_\alpha^{(-)}(p)\right)\right] E(p), \tag{116,6}$$

$$q - q_v = -|e| \sum_{\alpha, p} \left[N_\alpha^+(p) + N_\alpha^{(-)}(p) - N_{\alpha v}^{(-)}(p)\right]. \tag{116,7}$$

Из формул (116,6) и (116,7) мы видим, что если некоторое состояние с отрицательной энергией свободно, т. е. $N_\alpha^{(-)}(p) = 0$, то оно соответствует положительному вкладу в наблюдаемые значения энергии и заряда. Действительно, в формулы (116,6) и (116,7) входят выражения $N_{\alpha v}^{(-)}(p) - N_\alpha^{(-)}(p)$. Если состояние с отрицательной энергией свободно $N_\alpha^{(-)}(p) = 0$, то $\{N_{\alpha v}^{(-)}(p) - N_\alpha^{(-)}(p)\} = 1$. При этом возникает положительный вклад в энергию и заряд системы, равный соответственно $E_p$ и $|e|$. Таким образом, мы видим, что отсутствие электрона с импульсом $\boldsymbol{p}$ в сплошном фоне заполненных отрицательных состояний эквивалентно появлению наблюдаемой частицы с положительным зарядом, положительной энергией и импульсом $\boldsymbol{p}$. Такая частица, с зарядом $(+|e|)$ и массой, равной массе электрона, была названа позитроном. Она была обнаружена Андерсеном в космических лучах через несколько лет после появления теории Дирака.

На основе представлений Дирака оказалось возможным дать объяснение ряду известных в настоящее время физических эффектов. Например, очевидно, что электромагнитное поле может образовать пару электрон — позитрон, если энергия фотона $\hbar\omega$ больше, чем $2mc^2$. Последняя энергия необходима для того, чтобы перевести электрон из состояния с отрицательной энергией в состояние с положительной энергией.

Законы сохранения энергии и импульса ограничивают возможность реакции образования пары фотоном. Фактически эта реакция может происходить только вблизи третьего тела — например ядра, принимающего на себя часть импульса. Наряду с образованием пары электрон — позитрон возможна обратная реакция — аннигиляция позитронов. При аннигиляции электрон с положительной энергией переходит в незаполненное состояние

с отрицательной энергией. Разность энергии излучается в виде $\gamma$-квантов.

Теория Дирака позволила не только предсказать эти явления, но и вычислить эффективное сечение обоих процессов. Отличное согласие результатов расчетов с опытными данными явилось хорошим подтверждением правильности представлений Дирака. Однако последнее десятилетие ознаменовалось важнейшими теоретическими и экспериментальными достижениями, которые частично будут освещены в дальнейшем. Эти успехи позволили, с одной стороны, выявить реальность существования вакуума в смысле Дирака, а с другой стороны, расширить области применимости релятивистской квантовой механики. Как уже указывалось, вакуум представляет систему заряженных частиц, заполняющих все возможные состояния. При внесении в вакуум внешнего электрического заряда или при возникновении электромагнитного поля вакуум начинает взаимодействовать с внешними полями. Например, Лэмбом в 1953 г. было обнаружено, что уровни $^2S_{1/2}$ и $^2P_{1/2}$ атома водорода имеют несколько различные энергии (лэмбовское смещение). Этот эффект может быть объяснен только взаимодействием с вакуумом (см. §§ 119 и 128).

Таким образом, развитые Дираком представления о вакууме подтверждаются рядом разнообразных экспериментов.

Симметрия теории по отношению к электронам и позитронам находит свое выражение в том, что существует унитарный оператор $\hat{C}$, именуемый оператором зарядового сопряжения, который преобразует частицу в античастицу. Иными словами, действие оператора $\hat{C}$ меняет местами электрон и позитрон (с тем же самым спином и энергией).

Если обозначить через $\psi_e$ и $\psi_p$ волновые функции электрона и позитрона соответственно, то по определению для них можно написать (см. (113,17)):

$$\left\{\gamma_\mu\left(\hat{p}_\mu - \frac{e}{c}A_\mu\right) - imc\right\}\psi_e = 0, \qquad (116,8)$$

$$\left\{\gamma_\mu\left(\hat{p}_\mu + \frac{e}{c}A_\mu\right) - imc\right\}\psi_p = 0. \qquad (116,9)$$

Комплексно сопряженная к $\psi_e$ функция $\psi_e^*$ удовлетворяет при этом уравнению

$$\left\{\gamma_\mu^*\left(\hat{p}_\mu^* - \frac{e}{c}A_\mu^*\right) + imc\right\}\psi_e^* = 0,$$

или, поскольку

$$\hat{p}_i^* = -\hat{p}_i, \quad A_i^* = A_i\,(i = 1, 2, 3), \quad \hat{p}_4^* = \hat{p}_4, \quad A_4 = -A_4,$$

$$\left\{-\gamma_4^*\left(\hat{p}_4 + \frac{e}{c}A_4\right) + \gamma_i^*\left(\hat{p}_i + \frac{e}{c}A_i\right) - imc\right\}\psi_e^* = 0. \qquad (116,10)$$

На основании сравнения (116,9) и (116,10) естественно положить

$$\psi_p = \hat{C}\psi_e^*, \qquad \psi_e^* = \hat{C}^{-1}\psi_p. \tag{116,11}$$

Подставляя (116,11) в (116,9), имеем

$$\left\{\gamma_i\left(\hat{p}_i + \frac{e}{c}A_i\right) + \gamma_4\left(\hat{p}_4 + \frac{e}{c}A_4\right) - imc\right\}\hat{C}\psi_e^* = 0.$$

Умножая теперь слева на $\hat{C}^{-1}$

$$\hat{C}^{-1}\left\{\gamma_i\left(\hat{p}_i + \frac{e}{c}A_i\right) + \gamma_4\left(\hat{p}_4 + \frac{e}{c}A_4\right) - imc\right\}\hat{C}\psi_e^* = 0$$

или

$$\left\{\left(\hat{p}_i + \frac{e}{c}A_i\right)\hat{C}^{-1}\gamma_i\hat{C} + \left(\hat{p}_4 + \frac{e}{c}A_4\right)\hat{C}^{-1}\gamma_4\hat{C} - imc\right\}\psi_e^* = 0. \tag{116,12}$$

Для того чтобы (116,12) было тождественно (116,10), необходимо выполнение равенств

$$\hat{C}^{-1}\gamma_i\hat{C} = \gamma_i^*, \qquad \hat{C}^{-1}\gamma_4\hat{C} = -\gamma_4^* = -\gamma_4.$$

Если $\gamma_i$ и $\gamma_4$ определены формулами (113,14), то

$$\hat{C} = \gamma_2 = \begin{Vmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \end{Vmatrix}.$$

Из определения (116,11) непосредственно видно, что оператор $\hat{C}$ коммутирует с оператором Гамильтона. Таким образом, можно ввести две волновые функции $\psi_e$ и $\psi_p$, совершенно равноправные и связанные между собой сохраняющимися во времени соотношениями

$$\psi_p = \hat{C}\psi_e^* = \gamma_2\psi_e^*, \qquad \psi_e = \hat{C}^{-1}\psi_p^* = \gamma_2^{-1}\psi_p^*.$$

Обе волновые функции описывают частицы с одинаковой (положительной) энергией, массой и спином, но разными знаками заряда и магнитного момента. Введение зарядово-сопряженных волновых функций для равноправных частиц до известной степени снимает логические трудности, связанные с упрощенной трактовкой вакуума как фона, заполненного частицами с отрицательной энергией.

## § 117. Спин частиц, описываемых уравнением Дирака

Хотя до сих пор мы широко пользовались представлениями о спине частиц, оператор спина был введен чисто формальным образом, как необходимый прием для описания опытных фактов. Сейчас мы покажем, что существование спина непосредственно вытекает из уравнения Дирака. Для этого рассмотрим законы сохранения, следующие из уравнения Дирака.

Поскольку в теории Дирака сохраняются все общие положения квантовой механики, для отыскания законов сохранения необходимо составить коммутатор с оператором Гамильтона. Отличие от теории Шредингера заключается в том, что оператор Гамильтона имеет теперь вид (113,7).

Если оператор Гамильтона не зависит от времени (а для этого необходимо, чтобы не зависели от времени потенциалы внешнего поля), то имеет место закон сохранения энергии. В этом вопросе нет никакого различия между теорией Шредингера и теорией Дирака.

Для частицы, двигающейся в пустом пространстве, должен также сохраниться полный момент. Поэтому должен существовать оператор полного момента, коммутирующий с гамильтонианом.

Интересный результат получается при составлении коммутатора для оператора момента количества движения

$$\hat{\boldsymbol{L}} = [\hat{\boldsymbol{r}}\hat{\boldsymbol{p}}]$$

и гамильтониана.

Для наших целей следует ограничиться случаем свободной частицы. Выбирая произвольно ориентированную ось $z$, имеем:

$$\hat{H}\hat{L}_z - \hat{L}_z\hat{H} = (c\boldsymbol{\alpha}\hat{\boldsymbol{p}} + mc^2\beta)\hat{L}_z - \hat{L}_z(c\boldsymbol{\alpha}\hat{\boldsymbol{p}} + mc^2\beta).$$

Так как оператор $\hat{L}_z = \frac{\hbar}{i}\left(y\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial y}\right)$ коммутирует с операторами $\hat{\beta}$ и $\hat{\alpha}_z\hat{p}_z$, то получаем:

$$\hat{H}\hat{L}_z - \hat{L}_z\hat{H} = c\alpha_x(\hat{p}_x\hat{L}_z - \hat{L}_z\hat{p}_x) + c\alpha_y(\hat{p}_y\hat{L}_z - \hat{L}_z\hat{p}_y). \quad (117,1)$$

Используя свойства коммутаций проекций импульса с проекциями момента количества движения, находим:

$$\hat{H}\hat{L}_z - \hat{L}_z\hat{H} = i\hbar c(\alpha_y\hat{p}_x - \alpha_x\hat{p}_y). \quad (117,2)$$

Аналогичные результаты получаем для других проекций импульса.

Таким образом, момент количества движения не является интегралом движения и не сохраняется. Для того чтобы найти величину, играющую роль полного момента количества движения, введем оператор $\hat{\boldsymbol{J}} = \hat{\boldsymbol{L}} + \hat{\boldsymbol{s}}$, где $\hat{\boldsymbol{s}}$ — неизвестный оператор.

Будем требовать, чтобы оператор $\hat{J}$ коммутировал с оператором $\hat{H}$:

$$\hat{H}\hat{J}_i - \hat{J}_i\hat{H} = 0 \quad \text{или} \quad (\hat{H}\hat{L}_i - \hat{L}_i\hat{H}) + (\hat{H}\hat{s}_i - \hat{s}_i\hat{H}) = 0.$$

Подставляя $i = z$ и используя значение коммутатора (117,2), имеем

$$\hat{H}\hat{s}_z - \hat{s}_z\hat{H} = i\hbar c\,(\alpha_x\hat{p}_y - \alpha_y\hat{p}_x). \tag{117,3}$$

Попытаемся удовлетворить этому равенству, положив

$$\hat{s}_z = A\alpha_x\alpha_y, \tag{117,4}$$

где $A$ — неизвестная константа.

Вычислим далее коммутатор

$$\hat{H}\hat{s}_z - \hat{s}_z\hat{H}.$$

Используя (113,5), получаем

$$A\hat{H}\alpha_x\alpha_y - A\alpha_x\alpha_y\hat{H} =$$
$$= Ac\,(\alpha_x\hat{p}_x + \alpha_y\hat{p}_y)\,\alpha_x\alpha_y - Ac\alpha_x\alpha_y\,(\alpha_x\hat{p}_x + \alpha_y\hat{p}_y) = 2Ac\,(\alpha_y\hat{p}_x - \alpha_x\hat{p}_y).$$

Сравнивая последнее выражение с формулой (117,3), находим значение

$$A = -\frac{i\hbar}{2}.$$

Таким образом, оператор $s_z$ равен

$$\hat{s}_z = -\frac{i\hbar}{2}\alpha_x\alpha_y = -\frac{i\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & \sigma_x \\ \sigma_x & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & \sigma_y \\ \sigma_y & 0 \end{pmatrix} = -\frac{i\hbar}{2}\begin{pmatrix} \sigma_x\sigma_y & 0 \\ 0 & \sigma_x\sigma_y \end{pmatrix} =$$
$$= -\frac{i\hbar}{2}\begin{pmatrix} i\sigma_z & 0 \\ 0 & i\sigma_z \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} \sigma_z & 0 \\ 0 & \sigma_z \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}. \tag{117,5}$$

Две другие проекции вектора $\hat{s}_x$ и $\hat{s}_y$ получается из аналогичных расчетов:

$$\hat{s}_x = -\frac{i\hbar}{2}\alpha_y\alpha_z; \qquad \hat{s}_y = -\frac{i\hbar}{2}\alpha_z\alpha_x.$$

Найдем теперь оператор $\hat{s}^2 = \hat{s}_x^2 + \hat{s}_y^2 + \hat{s}_z^2$. Используя свойства операторов $\alpha_x$, $\alpha_y$, $\alpha_z$, найдем:

$$\hat{s}^2 = \frac{3}{4}\hbar^2\hat{I} = \hbar^2\frac{1}{2}\left(1 + \frac{1}{2}\right)\hat{I}. \tag{117,6}$$

Перейдем далее к обсуждению полученных результатов. Сохраняющуюся во времени величину $J$ следует, очевидно, считать полным моментом частицы. В свою очередь полный момент

является суммой орбитального и собственного, спинового момента частицы. Операторы $\hat{s}_z$ и $\hat{s}^2$ в формулах (117,5) и (117,6) приведены к диагональному виду. При этом проекция спина на ось $z$ может принимать два значения $\pm\hbar/2$. Собственные значения оператора $\hat{s}^2$ имеют вид $\hbar^2 s(s+1)$, где $s=\frac{1}{2}$. Отсюда очевидно, что частица обладает спином, равным $\hbar/2$.

## § 118. Переход от уравнения Дирака к уравнению Паули и магнитный момент частицы

Посмотрим теперь, как преобразуется уравнение Дирака, если совершить в нем переход к нерелятивистскому приближению. Рассмотрим общий случай, когда частица движется во внешнем электромагнитном поле, так что уравнение Дирака имеет вид (113,12). Так же как при предельном переходе в скалярном релятивистском уравнении, выделим прежде всего энергию покоя, т. е. произведем преобразование вида

$$\psi=\psi' e^{-\frac{imc^2}{\hbar}t}.$$

Тогда для функции $\psi'$ получим уравнение

$$i\hbar\frac{\partial\psi'}{\partial t}=\left[c\alpha\left(\hat{p}-\frac{e}{c}A\right)+mc^2(\beta-1)+e\varphi\right]\psi'. \tag{118,1}$$

Если волновую функцию записать в виде $\psi'=\begin{pmatrix} w \\ w' \end{pmatrix}$, то совершенно так же, как для свободной частицы, получаем уравнения для $w$ и $w'$:

$$\left.\begin{aligned} i\hbar\frac{\partial w}{\partial t}&=c\sigma\left(\hat{p}-\frac{e}{c}A\right)w'+e\varphi w,\\ i\hbar\frac{\partial w'}{\partial t}&=c\sigma\left(\hat{p}-\frac{e}{c}A\right)w-2mc^2w'+e\varphi w'. \end{aligned}\right\} \tag{118,2}$$

Как всегда, предельный переход к нерелятивистскому приближению соответствует формальному разложению по степеням $c$. Предположим вначале, что в общем случае движения частицы в поле, так же как и для свободной частицы, $w'\sim\frac{1}{c}w$. Тогда во втором из уравнений (118,2) можно пренебречь членами $i\hbar\frac{\partial w'}{\partial t}$ и $e\varphi w'$ как малыми по сравнению с величинами

$$c\sigma\left(\hat{p}-\frac{e}{c}A\right)w \quad \text{и} \quad mc^2w',$$

пропорциональными $c$. Тогда получаем для спинора $w'$ выражение

$$w' = \frac{1}{2mc}\sigma\left(\hat{\boldsymbol{p}} - \frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)w, \tag{118,3}$$

находящееся в согласии с нашим допущением.

Подставляя (118,3) в первое из уравнений (118,2), находим

$$i\hbar\frac{\partial w}{\partial t} = \frac{\left[\sigma\left(\hat{\boldsymbol{p}} - \frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)\right]^2}{2m}w + e\varphi w. \tag{118,4}$$

Раскроем квадрат оператора в явном виде

$$\left[\sigma\left(\hat{\boldsymbol{p}} - \frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)\right]^2 = \left[\sigma_x\left(\hat{p}_x - \frac{e}{c}A_x\right) + \sigma_y\left(\hat{p}_y - \frac{e}{c}A_y\right) + \sigma_z\left(\hat{p}_z - \frac{e}{c}A_z\right)\right]^2.$$

При перемножении следует помнить, что операторы $\hat{\boldsymbol{p}}$ и $\boldsymbol{A}$ не коммутируют между собой. Выполняя умножение, находим

$$\begin{aligned}\left[\sigma\left(\hat{\boldsymbol{p}} - \frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)\right]^2 &= \sigma_x^2\left(\hat{p}_x - \frac{e}{c}A_x\right)^2 + \sigma_y^2\left(\hat{p}_y - \frac{e}{c}A_y\right)^2 + \\ &+ \sigma_z^2\left(\hat{p}_z - \frac{e}{c}A_z\right)^2 + \sigma_x\sigma_y\left(\hat{p}_x - \frac{e}{c}A_x\right)\left(\hat{p}_y - \frac{e}{c}A_y\right) + \\ &+ \sigma_y\sigma_x\left(\hat{p}_y - \frac{e}{c}A_y\right)\left(\hat{p}_x - \frac{e}{c}A_x\right) + \sigma_x\sigma_z\left(\hat{p}_x - \frac{e}{c}A_x\right)\left(\hat{p}_z - \frac{e}{c}A_z\right) + \\ &+ \sigma_z\sigma_x\left(\hat{p}_z - \frac{e}{c}A_z\right)\left(\hat{p}_x - \frac{e}{c}A_x\right) + \sigma_y\sigma_z\left(\hat{p}_y - \frac{e}{c}A_y\right)\left(\hat{p}_z - \frac{e}{c}A_z\right) + \\ &+ \sigma_z\sigma_y\left(\hat{p}_z - \frac{e}{c}A_z\right)\left(\hat{p}_y - \frac{e}{c}A_y\right).\end{aligned} \tag{118,5}$$

Согласно (60,16) имеем для матриц Паули

$$\sigma_x^2 = \sigma_y^2 = \sigma_z^2 = 1.$$

Мы видим, что сумма первых трех членов приводится к виду

$$\sigma_x^2\left(\hat{p}_x - \frac{e}{c}A_x\right)^2 + \sigma_y^2\left(\hat{p}_y - \frac{e}{c}A_y\right)^2 + \sigma_z^2\left(\hat{p}_z - \frac{e}{c}A_z\right)^2 = \left(\hat{\boldsymbol{p}} - \frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)^2.$$

Дальнейшее преобразование будем производить только с членами

$$\sigma_x\sigma_y\left(\hat{p}_x - \frac{e}{c}A_x\right)\left(\hat{p}_y - \frac{e}{c}A_y\right) + \sigma_y\sigma_x\left(\hat{p}_y - \frac{e}{c}A_y\right)\left(\hat{p}_x - \frac{e}{c}A_x\right), \tag{118,6}$$

так как оставшиеся выражения преобразуются аналогичным (118,6) образом. Матрицы $\sigma_x$ и $\sigma_y$ антикоммутируют и, следовательно, выражение (118,6) можно переписать в виде

$$\frac{e}{c}\sigma_x\sigma_y\left[-\hat{p}_xA_y - A_x\hat{p}_y + \hat{p}_yA_x + A_y\hat{p}_x\right]. \tag{118,7}$$

Используя свойства коммутаций операторов $\hat{p}_x$ и $\hat{p}_y$ с операторами, зависящими от координат (26,10), имеем

$$\frac{e}{c}\sigma_x\sigma_y\left[-i\hbar\frac{\partial A_x}{\partial y}+i\hbar\frac{\partial A_y}{\partial x}\right]=\frac{ie\hbar}{c}\sigma_x\sigma_y\left[\frac{\partial A_y}{\partial x}-\frac{\partial A_x}{\partial y}\right]=$$
$$=\frac{ie\hbar}{c}\sigma_x\sigma_y\,\mathrm{rot}_z\,\boldsymbol{A}=\frac{ie\hbar}{c}\sigma_x\sigma_y\mathscr{H}_z.$$

Так как согласно (60,16) $\sigma_x\sigma_y = i\sigma_z$, то имеем окончательно

$$\frac{ie\hbar}{c}\sigma_x\sigma_y\mathscr{H}_z=-\frac{e\hbar}{c}\sigma_z\mathscr{H}_z.$$

Совершая аналогичные преобразования с оставшимися членами из (118,5), получаем

$$\left[\sigma\left(\hat{p}-\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)\right]^2=\left(\hat{p}-\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)^2-\frac{e\hbar}{c}\sigma\mathscr{H}. \tag{118,8}$$

Подставляя (118,8) в (118,4), находим

$$i\hbar\frac{\partial w}{\partial t}=\left\{\frac{\left(\hat{p}-\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)^2}{2m}+e\varphi-\frac{e\hbar}{2mc}\sigma\mathscr{H}\right\}w. \tag{118,9}$$

Мы видим, что при последовательном переходе к нерелятивистскому приближению уравнение Дирака автоматически переходит в уравнение Паули. Отсюда видно, что из теории Дирака следует не только существование спина частиц (равного $\hbar/2$), но и наличие у частиц собственного магнитного момента

$$\mu=\frac{e\hbar}{2mc}. \tag{118,10}$$

Теперь мы можем уточнить вопрос о том, к каким частицам, имеющим спин $\hbar/2$, можно применять уравнение Дирака. Если под $m$ понимать массу электрона, то получается хорошее согласие между вычисленным и измеренным значением магнитного момента.

Таким образом, уравнение Дирака описывает поведение электронов с большой степенью точности. Уравнение Дирака позволяет, по-видимому, успешно описать свойства нейтрино — частицы с массой покоя $m = 0$ (см. § 123).

Однако попытки применить уравнение Дирака к тяжелым частицам со спином 1/2 — протону и нейтрону — не привели к вполне удовлетворительным результатам. С другой стороны, некоторые общие и весьма важные выводы из уравнения Дирака удалось перенести и на тяжелые частицы.

Оказалось, что качественно описанное поведение быстрых протонов и нейтронов также укладывается в рамки уравнения Дирака. Особенно важно то обстоятельство, что основная идея

теории Дирака — существование античастиц — получила непосредственное подтверждение как для мезонов, так и для нуклонов.

В 1955 г. на ускорителе в реакции $p+p\to p+(\bar{p}+p)+p$ был обнаружен антипротон $\bar{p}$ — частица с отрицательным элементарным зарядом и с массой, равной массе протона. Несколько позднее наблюдалась реакция

$$p+\bar{p}\to n+\bar{n}$$

с образованием антинейтронов. Последние отличаются от нейтрона знаком магнитного момента и четностью. Античастицы аннигилируют с образованием других частиц. Например, протоны и антипротоны аннигилируют с образованием $\pi$- и $K$-мезонов.

Несмотря на все эти факты, количественные расчеты и, в частности, расчеты магнитного момента не согласуются с опытными данными. Если под $m$ в формуле (118,10) понимать массу протона, то для его магнитного момента получается значение, отличающееся от опытного в 2,7 раза.

Это расхождение теории с опытом связано, по-видимому, с тем, что тяжелые частицы — протоны и нейтроны — сильно взаимодействуют с полем мезонов. В этом их отличие от электронов, которые сравнительно слабо взаимодействуют с электромагнитным полем [1]).

## § 119. Атом водорода в теории Дирака

Хотя движение электрона в атоме водорода отвечает нерелятивистским скоростям, нахождение релятивистских поправок к уровням энергии водорода представляло большой интерес, поскольку теория Шредингера не могла объяснить появление тонкой структуры в спектре водорода.

В § 38 было найдено, что уровни энергии атомов водорода зависят только от главного квантового числа. Между тем опыт показывает, что главное квантовое число характеризует уровни энергии лишь приближенно. В действительности имеет место расщепление возбужденных уровней на близкие подуровни. В результате в спектре водорода наблюдалось расщепление спектральных линий, ясно заметное в обычном спектрометре и особенно точно измеренное с помощью современных методов радиоспектроскопии. Оказалось, что это расщепление уровней связано со спин-орбитальным взаимодействием и вытекает из теории Дирака.

---

[1]) Соображения о возможности применения уравнения Дирака к нуклонам подробнее см. в книге: А. И. Ахиезер и В. Б. Берестецкий, Квантовая электродинамика, «Наука», 1969, стр 129.

Уравнение Дирака для стационарного движения в кулоновском поле имеет вид

$$[c\alpha\hat{p} + mc^2\beta]\,\psi = \left(E + \frac{Ze^2}{r}\right)\psi.$$

Уравнение Дирака как и уравнение Шредингера, в кулоновском поле допускает точное решение. Однако в отличие от уравнения Шредингера уравнение Дирака не приводит к раздельным законам сохранения полного и спинового моментов (см. § 117). Вычисления показывают, что только в нерелятивистском приближении можно говорить о постоянных значениях орбитального и спинового моментов. В последнем случае оказывается, что гамильтониан приобретает вид [1])

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + U + \frac{1}{2mc^2}\frac{1}{r}\frac{\partial U}{\partial r}\hat{s}\hat{L} + O\left(\frac{1}{c^2}\right), \qquad (119{,}1)$$

где первые два члена совпадают с гамильтонианом уравнения Шредингера, а второе слагаемое представляет энергию спин-орбитального взаимодействия. Невыписанные члены порядка $1/c^2$ содержат релятивистские поправки к кинетической и потенциальной энергии, не имеющие наглядной интерпретации.

Решение уравнения Дирака приводит к следующему выражению для энергии электрона [2]):

$$E = mc^2 - \frac{Z^2e^4m}{2\hbar^2n^2} - \left(\frac{Ze^2}{\hbar c}\right)^4\frac{mc^2}{2n^4}\left(\frac{n}{\left(j+\frac{1}{2}\right)} - \frac{3}{4}\right), \qquad (119{,}2)$$

где $j = l + \frac{1}{2}$ — собственное значение оператора полного момента; остальные величины имеют тот же смысл, что и в формуле (38,17). Уровни энергии зависят теперь не только от $n$, но также и от $j$.

Случайное вырождение (см. § 38) снимается, и уровни энергии с одним и тем же значением $n$, но разными $j$ имеют различное значение. Однако это расщепление уровней весьма мало по сравнению с расстоянием между соседними уровнями с различными $n$.

Сохраняется вырождение состояний с одинаковыми значениями $j$. Например, при $n = 2$ имеются следующие три состояния: $2S_{1/2}$, $2P_{1/2}$ и $2P_{3/2}$. Первые два состояния являются вырожденными, поскольку они отвечают $n = 2$ и $j = 1/2$.

До сравнительно недавнего времени считалось, что теория Дирака передает тонкую структуру уровней водорода с огромной

---

1) См. Л. Шифф, Квантовая механика, ИЛ, 1957, стр. 379.

2) Для удобства сравнения с нерелятивистскими результатами формула (119,2) получена из точной формулы разложением по степеням $Ze^2/\hbar c$.

степенью точности. Точно совпадали с опытными данными расположение термов, правила отбора и интенсивности линий. Лишь в 1953 г. Лэмбом, применившим радиоспектроскопические методы измерения, было обнаружено, что уровни $2S_{1/2}$ и $2P_{1/2}$ имеют несколько различные энергии.

Это расхождение между формулой (119,2), полученной из теории Дирака, и опытом связано с фундаментальными свойствами материи — реальностью вакуума — и в конечном счете не только не противоречит теории Дирака, но является одним из самых блестящих ее подтверждений. Новые расчетные методы, с помощью которых из теории Дирака было найдено лэмбовское смещение, будут изложены в гл. XIV.

## § 120. Инвариантность уравнения Дирака по отношению к отражению, повороту и лоренцеву преобразованию координат

В § 113 мы рассмотрели некоторые свойства уравнения Дирака. Покажем теперь, что это уравнение удовлетворяет условиям инвариантности по отношению к отражению, повороту и преобразованию Лоренца. Поворот пространственной системы координат и преобразование Лоренца являются линейными и ортогональными преобразованиями. Мы можем записать их в виде

$$\left.\begin{aligned} x'_\mu &= a_{\mu\nu}x_\nu, \\ x_\nu &= a_{\mu\nu}x'_\mu, \\ a_{\mu\nu}a_{\mu\rho} &= \delta_{\nu\rho}. \end{aligned}\right\} \tag{120,1}$$

Найдем преобразование волновой функции

$$\psi' = S\psi, \tag{120,2}$$

которое оставляет инвариантным уравнение Дирака при линейных преобразованиях (120,1). Преобразованная волновая функция по условию удовлетворяет уравнению Дирака

$$\gamma_\mu \frac{\partial \psi'}{\partial x'_\mu} + \frac{mc}{\hbar}\psi' = 0. \tag{120,3}$$

Производные $\frac{\partial}{\partial x'_\mu}$ можно преобразовать с помощью соотношения

$$\frac{\partial}{\partial x'_\mu} = \frac{\partial}{\partial x_\nu}\frac{\partial x_\nu}{\partial x'_\mu} = a_{\mu\nu}\frac{\partial}{\partial x_\nu}. \tag{120,4}$$

Используя (120,4), преобразуем уравнение (120,3) к виду

$$a_{\mu\nu}\gamma_\mu S\frac{\partial \psi}{\partial x_\nu} + \frac{mc}{\hbar}S\psi = 0. \tag{120,5}$$

Если существует такая матрица $S^{-1}$, для которой выполняются условия

$$S^{-1}a_{\mu\nu}\gamma_\mu S = \gamma_\nu \quad \text{или} \quad S^{-1}\gamma_\mu S = \sum_\nu a_{\mu\nu}\gamma_\nu,$$

$$S^{-1}S = 1, \tag{120,6}$$

то, умножая уравнение (120,3) на матрицу $S^{-1}$, мы приходим к уравнению (113,13).

Найдем теперь явный вид матрицы линейного преобразования при повороте пространственной системы координат и преобразованиях Лоренца. В случае поворота системы координат в плоскости $x_1x_2$ коэффициенты $a_{\mu\nu}$ определяются из соотношений

$$\left.\begin{aligned} x_1' &= x_1\cos\varphi + x_2\sin\varphi, \\ x_2' &= -x_1\sin\varphi + x_2\cos\varphi. \end{aligned}\right\} \tag{120,7}$$

Покажем теперь, что если матрицу $S$ выбрать в виде

$$S = e^{\frac{\varphi}{2}\gamma_1\gamma_2}, \tag{120,8}$$

то соотношения (120,6) выполняются. Для этого разложим экспоненту в ряд

$$S = 1 + \frac{\varphi}{2}\gamma_1\gamma_2 + \frac{\varphi^2}{2!4}(\gamma_1\gamma_2)^2 + \frac{\varphi^3}{3!8}(\gamma_1\gamma_2)^3 + \frac{\varphi^4}{4!16}(\gamma_1\gamma_2)^4 + \ldots$$

Используя далее выражения

$$(\gamma_1\gamma_2)^2 = \gamma_1\gamma_2\gamma_1\gamma_2 = -\gamma_1\gamma_1\gamma_2\gamma_2 = -1,$$

$$(\gamma_1\gamma_2)^3 = (\gamma_1\gamma_2)^2\gamma_1\gamma_2 = -\gamma_1\gamma_2,$$

$$(\gamma_1\gamma_2)^4 = (\gamma_1\gamma_2)^2(\gamma_1\gamma_2)^2 = 1,$$

найдем

$$S = \left(1 - \frac{\varphi^2}{2!4} + \frac{\varphi^4}{4!16} - \ldots\right) + \gamma_1\gamma_2\left(\frac{\varphi}{2} - \frac{\varphi^3}{3!8} + \frac{\varphi^5}{5!32} - \ldots\right). \tag{120,9}$$

Легко заметить, что матрица $S$ равна

$$S = \cos\frac{\varphi}{2} + \gamma_1\gamma_2\sin\frac{\varphi}{2}. \tag{120,10}$$

Проверим теперь соотношения (120,6). Равенство $S^{-1}S = 1$ является очевидным. Найдем, например, выражение

$$S^{-1}\gamma_1 S = \left(\cos\frac{\varphi}{2} - \gamma_1\gamma_2\sin\frac{\varphi}{2}\right)\gamma_1\left(\cos\frac{\varphi}{2} + \gamma_1\gamma_2\sin\frac{\varphi}{2}\right).$$

Пользуясь свойствами матриц $\gamma$ и элементарными тригонометрическими формулами, найдем

$$S^{-1}\gamma_1 S = \gamma_1 \cos\varphi + \gamma_2 \sin\varphi = a_{11}\gamma_1 + a_{12}\gamma_2 = a_{1\nu}\gamma_\nu,$$

что находится в полном согласии с (120,6).

Перейдем теперь к преобразованиям Лоренца. Согласно § 10 ч. II преобразования Лоренца можно трактовать как поворот на мнимый угол $\varphi = i\chi$ в плоскости $x_1x_4$:

$$x_1' = x_1 \operatorname{ch}\chi - x_0 \operatorname{sh}\chi, \quad \operatorname{th}\chi = \frac{v}{c};$$

$$x_0' = -x_1 \operatorname{sh}\chi + x_0 \operatorname{ch}\chi, \quad \operatorname{sh}\chi = \frac{v}{c\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}}}.$$

Матрицу $S$ можно найти по аналогии с (120,8), заменив угол $\varphi \to i\chi$. Тогда $S$ приобретает такой вид:

$$S = e^{\frac{i\chi}{2}\gamma_1\gamma_4} = \operatorname{ch}\frac{\chi}{2} + i\gamma_1\gamma_4 \operatorname{sh}\frac{\chi}{2}. \qquad (120,11)$$

Помимо преобразования поворота и преобразования Лоренца необходимо рассмотреть преобразование инверсии в начале координат. При инверсии координат пространственные координаты изменяются по формулам

$$\left.\begin{aligned} x_1 &\to -x_1', \\ x_2 &\to -x_2', \\ x_3 &\to -x_3', \\ x_4 &= x_4'. \end{aligned}\right\} \qquad (120,12)$$

Мы должны потребовать, чтобы уравнение

$$\sum_{i=1}^{3} \gamma_i \frac{\partial\psi'}{\partial x_i'} + \gamma_4 \frac{\partial\psi'}{\partial x_4'} + \frac{mc}{\hbar}\psi' = 0$$

оставалось инвариантным при замене (120,12), а волновая функция подверглась преобразованию

$$\psi' = \hat{I}\psi.$$

Легко убедиться, что требование инвариантности будет выполняться, если оператор $\hat{I}$ имеет вид

$$\hat{I} = a\beta, \qquad (120,13)$$

где $a$ — некоторое число. Действительно, используя (120,12)

и (120,13), получаем

$$-\sum_{i=1}^{3}\gamma_i\hat{I}\,\frac{\partial\psi}{\partial x_i}+\hat{I}\gamma_4\frac{\partial\psi}{\partial x_4}+\frac{mc}{\hbar}\hat{I}\psi=0.$$

Умножив последнее уравнение слева на $\beta$ и разделив на $a$, получаем уравнение (113,13).

Двойное преобразование инверсии либо возвращает систему в первоначальное состояние, либо отвечает повороту на $2\pi$. В последнем случае $\psi$ изменяет свой знак (см. (120,10)). Отсюда получаем условие

$$a^2=\pm 1. \tag{120,14}$$

Для дальнейшего нам потребуются законы преобразования функции

$$\bar{\psi}=\psi^{+}\gamma_4. \tag{120,15}$$

Их можно вывести, если заметить, что функция $\psi^{+}$ удовлетворяет уравнению

$$\sum_{i=1}^{3}\frac{\partial\psi^{+}}{\partial x_i}\gamma_i+\frac{mc}{\hbar}\psi^{+}-\frac{\partial\psi^{+}}{ic\,\partial t}\gamma_4=0. \tag{120,16}$$

Требования инвариантности этого уравнения по отношению к повороту пространственной системы координат и преобразованию Лоренца приводят к условию

$$\bar{\psi}'=\bar{\psi}S^{-1}. \tag{120,17}$$

При преобразовании инверсии находим $\bar{\psi}'=a^{*}\bar{\psi}\gamma_4$.

## § 121. Законы преобразования билинейных комбинаций, составленных из волновых функций

В дальнейшем при обсуждении одной из основных проблем современной физики — проблемы взаимодействия между элементарными частицами — нам придется воспользоваться некоторыми свойствами билинейных комбинаций, составленных из волновой функции $\psi$ и сопряженной с ней функции $\bar{\psi}$.

Именно, как мы увидим в дальнейшем, для релятивистски-инвариантной формулировки закона взаимодействия ядерных частиц необходимо знать законы изменения билинейных комбинаций из указанных величин при преобразованиях Лоренца, пространственных поворотах и инверсии. Простой подсчет показывает, что из компонент волновой функции и матриц $\gamma$ можно

построить некоторые билинейные комбинации, которые обладают следующими трансформационными свойствами:

$\bar{\psi}\psi$ — одна компонента (скаляр),
$\bar{\psi}\gamma_i\psi$ — четыре компоненты (4-вектор),
$\bar{\psi}\gamma_i\gamma_5\psi$ — четыре компоненты (псевдовектор),
$\bar{\psi}\gamma_i\gamma_k\psi$ — шесть компонент $i \neq k$ (4-тензор второго ранга),
$\bar{\psi}\gamma_5\psi$ — одна компонента (псевдоскаляр).

Здесь введено обозначение

$$\gamma_5 = \gamma_1\gamma_2\gamma_3\gamma_4 = -\begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \qquad (121,1)$$

Величина $\gamma_5$ обладает следующими свойствами:

$$\gamma_5^2 = 1, \quad \gamma_5\gamma_\mu + \gamma_\mu\gamma_5 = 0, \quad \mu = 1, 2, 3, 4.$$

В правильности последних соотношений легко убедиться непосредственной проверкой. Перейдем к доказательству указанных трансформационных свойств. При преобразованиях Лоренца и пространственного поворота в силу (120,2) и (120,17) можно написать $\bar{\psi}'\psi' = \bar{\psi}S^{-1}S\psi = \bar{\psi}\psi$. При отражении системы координат величина $\bar{\psi}\psi$ также остается неизменной в силу $\bar{\psi}'\psi' = a^*\bar{\psi}\gamma_4 a\gamma_4\psi = \bar{\psi}\psi$. Таким образом, мы видим, что величина $\bar{\psi}\psi$ является инвариантом по отношению к ортогональному преобразованию.

Покажем далее, что четыре величины $\bar{\psi}\gamma_i\psi$ преобразуются как компоненты четырехмерного вектора. При повороте системы координат и преобразовании Лоренца можем написать так:

$$\bar{\psi}'\gamma_i\psi' = \bar{\psi}S^{-1}\gamma_i S\psi.$$

В соответствии с формулой (120,6) находим

$$\bar{\psi}'\gamma_i\psi' = a_{i\nu}\bar{\psi}\gamma_\nu\psi. \qquad (121,2)$$

При инверсии координат получаем

$$\bar{\psi}'\gamma_i\psi' = a^*a\bar{\psi}\gamma_4\gamma_i\gamma_4\psi = -\bar{\psi}\gamma_i\psi \quad (i \neq 4). \qquad (121,3)$$

Таким образом, величина $\bar{\psi}\gamma_i\psi$ при инверсии изменяет свой знак. Формулы (121,2) и (121,3) показывают, что четыре компоненты действительно образуют четырехмерный вектор.

Покажем теперь, что величина $\bar{\psi}\gamma_5\psi$ представляет псевдоскаляр. При инверсии координат имеем

$$\bar{\psi}'\gamma_5\psi' = a^*a\bar{\psi}\gamma_4\gamma_1\gamma_2\gamma_3\gamma_4\gamma_4\psi.$$

Используя вид матрицы $\gamma_5$ и свойство коммутаций матриц $\gamma_i\gamma_k + \gamma_k\gamma_i = 2\delta_{ik}$, легко находим

$$\bar{\psi}'\gamma_5\psi' = -\bar{\psi}\gamma_5\psi,$$

что и доказывает высказанное ранее утверждение. Величины $\bar{\psi}\gamma_i\gamma_5\psi$ при отражении не меняют знак, а при преобразованиях поворота и лоренцевых преобразованиях преобразуются как компоненты вектора. Следовательно, мы можем утверждать, что эти величины являются компонентами четырехмерного аксиального вектора или псевдовектора.

В тензорном характере величин $\bar{\psi}\gamma_i\gamma_k\psi$ можно убедиться аналогичным образом:

$$\bar{\psi}'\gamma_i\gamma_k\psi' = \bar{\psi}S^{-1}\gamma_i\gamma_k S\psi = \bar{\psi}S^{-1}\gamma_i SS^{-1}\gamma_k S\psi = a_{il}a_{km}\bar{\psi}\gamma_l\gamma_m\psi,$$

что совпадает с определением тензора.

## § 122. Понятие о слабых взаимодействиях. Несохранение четности

Мы видели уже, что, кроме электромагнитного взаимодействия, в природе имеется и другой вид взаимодействия — сильное взаимодействие между нуклонами.

Оказалось, что между частицами, помимо сильного взаимодействия, существует еще один вид взаимодействия, также не электромагнитного характера, получивший название слабого взаимодействия (см. § 130).

Слабые взаимодействия, не могущие связать воедино ядерные нуклоны, играют большую роль в физике элементарных и ядерных частиц. Они являются ответственными за радиоактивный распад ядер с испусканием легких частиц — электронов и нейтрино. Иными словами, слабое взаимодействие между элементарными частицами приводит к $\beta$-распаду.

Теория слабых взаимодействий достигла в последнее время существенных успехов. Однако последовательное рассмотрение относящихся сюда вопросов возможно лишь в рамках квантовой теории поля и поэтому мы ограничимся лишь некоторыми замечаниями. Прежде всего заметим, что уравнение Дирака (113,7) можно рассматривать как уравнение для некоторого электронно-позитронного поля $\psi$. О таком полевом подходе мы уже упоминали в § 112, когда рассматривали уравнение Клейна — Гордона — Фока. Частицы при полевом описании рассматриваются как кванты возбуждения соответствующего поля (например, фотоны — кванты возбуждения электромагнитного поля [см. §§ 101 и 102]). Тогда функцию $\psi$ следует рассматривать как оператор в пространстве чисел заполнения (ср. формулу (99,26)

теории вторичного квантования). Конечно, переходя к «полевому» описанию, мы отказываемся от одночастичной трактовки уравнения Дирака. Оператор $\psi$ имеет отличные от нуля матричные элементы, соответствующие поглощению электрона и рождению позитрона, оператор $\psi^{+}$, наоборот, — рождению электрона и поглощению позитрона. Подобного рода соображения являются общими и относятся также к другим частицам ($\mu$-мезонам, нейтрино, нуклонам и т. д.).

Рассмотрим теперь какой-либо процесс, например, распад $\mu$-мезона с испусканием нейтрино и антинейтрино:

$$\mu \rightarrow e + \nu + \bar{\nu}.$$

Напомним, что, по определению, нейтрино называют частицу, испускаемую при позитронном распаде протона

$$p \rightarrow e^{+} + n + \nu,$$

а антинейтрино — частицу, испускаемую при $\beta$-распаде нейтрона

$$n \rightarrow p + e^{-} + \bar{\nu}.$$

Имеющиеся в настоящее время экспериментальные данные показывают, что эти частицы не тождественны.

В процессе распада $\mu$-мезона участвуют четыре частицы со спином $1/2$, четыре фермиона.

Для описания $\mu$-мезона, электрона и нейтрино вводим операторы соответственно $\psi_{\mu}$, $\psi_{e}$ и $\psi_{\nu}$, каждый из которых удовлетворяет соответствующему уравнению Дирака. Основная задача теперь заключается в выборе взаимодействия, приводящего к распаду. Для этого нужно сформулировать гамильтониан взаимодействия

$$\hat{H}' = \int \hat{\boldsymbol{H}}' dV, \tag{122,1}$$

где $\hat{\boldsymbol{H}}'$ — плотность гамильтониана взаимодействия.

Так как $\psi$ — операторы в пространстве чисел заполнения, то плотность гамильтониана взаимодействия должна содержать эти операторы, аналогично тому, как это имеет место в нерелятивистской физике (§ 99).

Из структуры выражения (122,1) видно, что плотность гамильтониана взаимодействия $\hat{\boldsymbol{H}}'$ (слово «плотность» мы будем иногда опускать) должна быть релятивистским скаляром (инвариантом по отношению к повороту и преобразованию Лоренца). До последнего времени не возникали сомнения в существовании симметрии по отношению к «правому» и «левому», т. е. предполагалось, что при любых взаимодействиях выполняется закон сохранения четности. Поэтому считалось, что плотность $\hat{\boldsymbol{H}}'$ должна быть инвариантом и по отношению к преобразованиям инверсии. Требование релятивистской инвариантности

резко ограничивает класс возможных выражений для $\hat{H}'$. Именно, поскольку в теории относительности всякое взаимодействие имеет характер близкодействия, значения характеристик всех частиц — операторов $\psi$, следует брать в одной точке пространства и в один момент времени.

Для процесса $\beta$-распада с участием четырех фермионов

$$A+B\rightarrow C+D \tag{122,2}$$

Ферми был предложен наиболее простой закон взаимодействия в виде

$$\hat{H}' \sim (\bar{\psi}_C\Gamma\psi_A)(\bar{\psi}_D\Gamma\psi_B)+\text{э. с.}, \tag{122,3}$$

где э. с. обозначает эрмитово сопряженное выражение, а значение всех операторов $\psi_i$ берется в одной точке. Величина $\Gamma$ может иметь следующие значения:

$\Gamma_1 = 1$ — скалярный вариант,

$\Gamma_2 = \gamma_\mu$ — векторный вариант,

$\Gamma_3 = \sigma_{\mu\nu}$ — тензорный вариант,

$\Gamma_4 = \gamma_\mu\gamma_5$ — псевдовекторный вариант,

$\Gamma_5 = \gamma_5$ — псевдоскалярный вариант,

где $\sigma_{\mu\nu} = -\frac{i}{2}(\gamma_\mu\gamma_\nu - \gamma_\nu\gamma_\mu)$; $\mu,\ \nu = 1, 2, 3, 4$, а по повторяющимся векторным индексам в (122,3) производится суммирование от единицы до четырех.

В плотность гамильтониана (122,3) не включены производные от операторов $\psi$ и $\bar{\psi}$. Эта форма гамильтониана взаимодействия получила название «связь без производных». Ниже мы вернемся к вопросу об отсутствии производных в законе взаимодействия.

Трансформационные свойства билинейных комбинаций типа $(\bar{\psi}_C\Gamma\psi_A)$ были нами установлены в § 121. Поскольку оператор $\hat{H}'$ содержит произведения, в которые величины $\Gamma$ входят дважды, он является скаляром при всех $\Gamma$. Так, например, для векторного варианта взаимодействия имеем:

$$\hat{H}' = g_2(\bar{\psi}_C\gamma_\mu\psi_A)(\bar{\psi}_D\gamma_\mu\psi_B)+\text{э. с.},$$

где постоянная $g_2$ носит название константы связи или постоянной взаимодействия векторного варианта. Векторный вариант строится как скалярное произведение двух четырехмерных векторов (по $\mu$ производится суммирование от 1 до 4). Добавление эрмитово сопряженных членов делает оператор эрмитовым.

В общем случае плотность гамильтониана представляет сумму всех пяти типов взаимодействия. Написанное выражение

удовлетворяет требованиям теории относительности и, помимо характеристик частиц — операторов $\psi$, содержит лишь постоянную взаимодействия и матрицы, входящие в уравнение Дирака.

Вернемся теперь к процессу распада $\mu$-мезона с испусканием нейтрино и антинейтрино. Поскольку оператор $\psi_\nu$ описывает как испускание антинейтрино, так и поглощение нейтрино, процесс распада $\mu$-мезона эквивалентен процессу с поглощением нейтрино

$$\mu + \nu \rightarrow e + \nu.$$

Соответственно $\hat{H}'$ имеет вид

$$\hat{H}' = \sum_{k=1}^{5} g_k (\bar{\psi}_e \Gamma_k \psi_\nu)(\bar{\psi}_\nu \Gamma_k \psi_\mu) + \text{э. с.} \tag{122,4}$$

Использование гамильтониана (122,3) привело к определенным успехам в построении теории $\beta$-распада. Как будет ясно из последующего, использование гамильтониана (122,4) подготовило почву к разработке современной теории $\beta$-распада.

Дальнейшее существенное развитие теории было связано с открытием несохранения четности в слабых взаимодействиях. Предположение о несохранении четности в слабых взаимодействиях было сделано Ли и Янгом [1]) на основании существования данных о двух типах распада $K$-мезонов.

$K$-мезоны — это группа элементарных частиц (положительная, отрицательная и две нейтральных) со спином, равным нулю, и массой около 966 электронных масс. Все $K$-мезоны неустойчивы и распадаются с временем жизни $1{,}2 \cdot 10^{-8}$ *сек* у заряженных и $10^{-10}$ *сек* и $6 \cdot 10^{-8}$ у нейтральных. Оказалось, что, помимо распада на $\mu$-мезон и нейтрино, $K$-мезоны могут распадаться по схеме

$$K^+ \rightarrow \pi^+ + \pi^0, \qquad (\theta\text{-распад}),$$

$$K^+ \rightarrow \begin{cases} \pi^+ + \pi^- + \pi^+, \\ \pi^+ + \pi^0 + \pi^0 \end{cases} \qquad (\tau\text{-распад}).$$

Возможность распада $K$-мезона на два или на три $\pi$-мезона непосредственно противоречит закону сохранения четности. Действительно, анализ свойств $\pi$-мезонов и их углового распределения показывает, что четность систем из двух и трех мезонов отличаются друг от друга.

Еще более определенные указания на несохранение четности были получены позднее при изучении $\beta$-распада поляризованных ядер $Co^{60}$. Ядра $Co^{60}$ обладают отличным от нуля спином $\boldsymbol{\sigma}$. Это

---

[1]) Ли Цзун-дао и Янг Чжень-нин, Статья в сборнике «Новые свойства симметрии элементарных частиц», ИЛ, 1957.

обстоятельство налагает известные требования на угловое распределение вылетающих из них β-электронов. Именно, из закона сохранения четности вытекает, что распределение электронов должно обладать симметрией относительно направления вектора $\boldsymbol{\sigma}$. Число электронов, вылетающих под углом $\theta$ и $180° - \theta$ к направлению $\boldsymbol{\sigma}$, должно быть одинаковым. Действительно, если представить число электронов, вылетающих в телесном угле $d\Omega$, в виде

$$dI = F(\theta)\, d\Omega,$$

где $F$ — некоторая функция угла $\theta$ между векторами $\boldsymbol{p}$ и $\boldsymbol{\sigma}$, то это соотношение не должно нарушаться при преобразовании инверсии.

При преобразовании инверсии $\boldsymbol{\sigma}$, как аксиальный вектор, не изменяется, а полярный вектор $\boldsymbol{p}$ меняет знак. Поэтому при инверсии угол $\theta$ преобразуется: $\theta \to 180° - \theta$. Таким образом, закон сохранения четности требует инвариантности функции распределения

$$F(\theta) = F(180° - \theta).$$

Прямые измерения показали, что угловое распределение β-электронов, вылетающих из поляризованных ядер $Co^{60}$, не обладает указанной симметрией. Напротив, электроны вылетают преимущественно в направлении, противоположном ориентации спина ядра. Таким образом, β-распад поляризованных ядер непосредственно демонстрирует нарушение закона сохранения четности.

Закон сохранения четности, как мы видели в § 33, связан со свойствами симметрии пространства. Нарушение четности означало бы, что пространство не обладает симметрией и в нем понятие «право» и «лево» имеет абсолютный характер. Такая трактовка создала бы исключительно серьезные трудности в истолковании всех законов физики. Казалось совершенно непонятным, как пространство, оставаясь однородным и изотропным, может быть асимметричным.

Выход из этой трудности был предложен Л. Д. Ландау. Он заключается в том, что, согласно гипотезе Ландау, асимметричным является не пространство, а сами частицы. Ландау[1]) был предложен принцип комбинированной четности. Согласно этому принципу, все физические законы должны оставаться инвариантными при комбинированной инверсии — пространственной инверсии и одновременной замене частиц на античастицы (так называемое зарядовое сопряжение). Примерами последнего может служить замена электронов позитронами, протонов антипротонами и т. д.

---

[1]) Л. Д. Ландау, ЖЭТФ 32, 405 (1957).

Сохранение комбинированной четности было проверено на довольно большом экспериментальном материале. Поэтому тем более неожиданным оказалось слабое нарушение этого закона сохранения, обнаруженное в опытах по распаду нейтральных К-мезонов.

Несохранение четности при слабых взаимодействиях приводит к тому, что гамильтониан $\hat{H}'$ уже не обязательно должен быть скаляром по отношению к отражениям. В общем случае, следовательно, гамильтониан (122,3) следует дополнить, введя в него члены, которые меняют знак при отражении координат

$$\hat{H}' = \sum_{k=1}^{5} \{g_k (\bar{\psi}_C \Gamma_k \psi_A)(\bar{\psi}_D \Gamma_k \psi_B) + g'_k (\bar{\psi}_C \Gamma_k \psi_A)(\bar{\psi}_D \Gamma_k \gamma_5 \psi_B)\} + \text{э. с.} \tag{122,5}$$

Второе слагаемое в каждом члене суммы является псевдоскаляром. Постоянные $g'_k$, вообще говоря, не совпадают с постоянными $g_k$. Увеличение числа постоянных, казалось бы, затрудняет интерпретацию имеющихся экспериментальных данных и сравнение их с выводами теории. Однако на самом деле несохранение четности открыло новые возможности и привело к формулировке универсального закона четырехфермионных взаимодействий.

## § 123. Теория двухкомпонентного нейтрино. Универсальное четырехфермионное взаимодействие

Открытие несохранения четности в слабых взаимодействиях позволило сформулировать теорию продольного или двухкомпонентного нейтрино[1]). Теория двухкомпонентного нейтрино основана на предположении, что масса нейтрино не просто мала, но точно равна нулю. Поскольку нейтрино имеет спин, равный половине, оно описывается уравнением Дирака, которое при $m = 0$ для состояния с заданным импульсом $p$ имеет вид[2]) [см. (115,3)]

$$Eu = (\boldsymbol{\alpha p})\, u, \qquad E = \pm |\boldsymbol{p}|. \tag{123,1}$$

От уравнения (123,1) для четырехкомпонентной функции $u$ можно перейти к уравнению для двухкомпонентных функций. Полагая $u = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} w \\ w' \end{pmatrix}$ и учитывая, что $\boldsymbol{\alpha} = \begin{pmatrix} 0 & \boldsymbol{\sigma} \\ \boldsymbol{\sigma} & 0 \end{pmatrix}$, перепишем

---

[1]) Л. Д. Ландау, ЖЭТФ **32**, 407 (1957); Nuclear Phys. **3**, 127 (1957); A. Salam, Nuovo Cimento **5**, 299 (1957). См. перевод в сборнике «Новые свойства симметрии элементарных частиц», ИЛ, 1957.

[2]) В этом параграфе и далее мы пользуемся системой единиц, в которой $\hbar = 1$, $c = 1$.

уравнение (123,1) в виде

$$\left.\begin{aligned} Ew &= (\sigma p)\, w', \\ Ew' &= (\sigma p)\, w. \end{aligned}\right\} \tag{123,2}$$

Складывая и вычитая уравнения (123,2), получим

$$\left.\begin{aligned} E\varphi_+ &= (\sigma p)\, \varphi_+, \\ E\varphi_- &= -(\sigma p)\, \varphi_-, \end{aligned}\right\} \tag{123,3}$$

где

$$\varphi_+ = \frac{1}{\sqrt{2}}(w + w'), \qquad \varphi_- = \frac{1}{\sqrt{2}}(w - w').$$

Мы видим, что двухкомпонентные функции $\varphi_+$ и $\varphi_-$ удовлетворяют уравнениям первого порядка. Конечно, если бы четность сохранялась, мы не могли бы пользоваться суперпозицией функций $w$ и $w'$, так как эти функции по-разному преобразуются при инверсии системы координат. Действительно, поскольку $\sigma$ — аксиальный вектор, а $p$ — полярный вектор, то произведение $(\sigma p)$ является псевдоскаляром. Тогда из (123,2) видим, что если $w$ преобразуется при отражении как полярный спинор, то $w'$ образуется как псевдоспинор, и наоборот.

Выбирая направление вектора $p$ за ось $z$, получаем из (123,3):

$$\left.\begin{aligned} \sigma_z\varphi_+ &= \varphi_+ \quad &\text{при}\quad E &= |p|, \\ \sigma_z\varphi_+ &= -\varphi_+ \quad &\text{при}\quad E &= -|p| \end{aligned}\right\} \tag{123,4}$$

и

$$\left.\begin{aligned} \sigma_z\varphi_- &= -\varphi_- \quad &\text{при}\quad E &= |p|, \\ \sigma_z\varphi_- &= \varphi_- \quad &\text{при}\quad E &= -|p|. \end{aligned}\right\} \tag{123,5}$$

Мы видим, что функции $\varphi_+$ и $\varphi_-$ описывают состояния, поляризация (проекция спина на ось $z$) которых однозначно связана со знаком энергии. Так, функция $\varphi_-$ описывает состояние, поляризованное против направления импульса при $E = |p|$ и по направлению импульса при $E = -|p|$, а функция $\varphi_+$, наоборот, — состояние, поляризованное по импульсу при $E = |p|$ и против импульса при $E = -|p|$.

В теории продольного нейтрино предполагается, что нейтрино ($E = |p|$) и антинейтрино ($E = -|p|$) описываются функцией $\varphi_-$, т. е. нейтрино всегда поляризовано против направления импульса, а антинейтрино — всегда по направлению импульса. Конечно, с равным успехом можно было бы предположить, что нейтрино и антинейтрино описываются функцией $\varphi_+$, однако это приводит к выводам, не согласующимся с данными эксперимента. Если энергию антинейтрино также считать положительной

$E = |\boldsymbol{p}|$, то антинейтрино будет описываться функцией $\varphi_+$ [ср. первое уравнение (123,4) и второе уравнение (123,5)].

При инверсии системы координат аксиальный вектор $\boldsymbol{\sigma}$ не изменяется, а полярный вектор $\boldsymbol{p}$ изменяет направление на противоположное. Следовательно, при этом нейтрино переходит в антинейтрино и наоборот, в согласии с идеями, выдвинутыми Л. Д. Ландау (сохранение комбинированной четности).

Весь приведенный вывод существенно основывался на предположении, что масса нейтрино строго равна нулю. Это сразу следует и из следующих наглядных соображений. Если бы масса нейтрино не была бы равна нулю, то оно двигалось бы со скоростью, меньшей скорости света. Тогда нашлась бы такая инерциальная система координат, двигающаяся относительно лабораторной со скоростью, большей скорости нейтрино, в которой направление импульса нейтрино изменилось бы на обратное. Так как направление спина при таком преобразовании не изменяется, мы имели бы в одной инерциальной системе координат нейтрино, а в другой антинейтрино, т. е. пришли бы к противоречию, поскольку нейтрино и антинейтрино, по предположению, не тождественны.

Не представляет труда сформулировать теорию продольного нейтрино в рамках обычного аппарата, т. е. с помощью четырехкомпонентных функций. Именно, легко видеть [см. (113,16)], что если биспинор $\psi$ является решением уравнения Дирака с массой покоя, равной нулю,

$$\gamma_\mu \frac{\partial \psi}{\partial x_\mu} = 0,$$

то решением этого уравнения будут и функции $\psi_+$ и $\psi_-$:

$$\left.\begin{aligned} \psi_+ &= \frac{1}{\sqrt{2}}(1-\gamma_5)\,\psi, \\ \psi_- &= \frac{1}{\sqrt{2}}(1+\gamma_5)\,\psi, \end{aligned}\right\} \tag{123,6}$$

или соответственно для состояний с определенным импульсом

$$u_+ = \frac{1}{\sqrt{2}}(1-\gamma_5)\,u, \qquad u_- = \frac{1}{\sqrt{2}}(1+\gamma_5)\,u, \tag{123,7}$$

где $u$ удовлетворяет уравнению (123,1).

Легко видеть, что функции $u_+$ и $u_-$ выражаются через $\varphi_+$ и $\varphi_-$. Действительно, полагая $u = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} w \\ w' \end{pmatrix}$ и учитывая, что $\gamma_5 = -\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$, где четырехрядная матрица записана через

двухрядные, получаем:

$$\left.\begin{aligned} u_+ &= \frac{1}{2}\begin{pmatrix} w+w' \\ w+w' \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} \varphi_+ \\ \varphi_+ \end{pmatrix}, \\ u_- &= \frac{1}{2}\begin{pmatrix} w-w' \\ -(w-w') \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} \varphi_- \\ -\varphi_- \end{pmatrix}. \end{aligned}\right\} \tag{123,8}$$

Функция

$$\psi_- = u_- e^{i\,(pr-Et)}, \tag{123,9}$$

описывает нейтрино при $E = |p|$. Она является собственной функцией оператора проекции спина $\hat{s}_z$, $\hat{s}_z = \begin{pmatrix} \sigma_z & 0 \\ 0 & \sigma_z \end{pmatrix}$, соответствующей собственному значению —1, $\hat{s}_z u_- = -u_-$ при $E = |p|$ (нейтрино). Антинейтрино ($E = |p|$) описывается функцией $u_+$ и $\psi_+$ соответственно. При действии оператора $\hat{s}_z$ имеем $\hat{s}_z u_+ = u_+$ при $E = |p|$ (антинейтрино).

Заметим также, что функции $\psi_+$ и $\psi_-$ являются собственными функциями оператора $\gamma_5$. Действительно, так как $\gamma_5^2 = 1$, то из (123,6) следует, что

$$\left.\begin{aligned} \gamma_5\psi_+ &= -\psi_+, \\ \gamma_5\psi_- &= \psi_-. \end{aligned}\right\} \tag{123,10}$$

Оператор $\gamma_5$ получил название оператора спиральности. Собственному значению $\gamma_5 = +1$ отвечает левая спиральность, собственному значению $\gamma_5 = -1$ — правая спиральность. В терминах оператора спиральности предыдущим результатам может быть придано наглядное толкование: у частицы между направлением вектора импульса и направлением вектора спина имеется строгая корреляция. У нейтрино спин $\sigma$ антипараллелен $p$ ($\gamma_5 = 1$); у антинейтрино параллелен ($\gamma_5 = -1$). Если наглядно представлять спин как вращение частицы, то нейтрино вращается как левый винт вокруг оси $p$ (рис. 28). При пространственной инверсии направление $p$ изменяется на противоположное, а вектор $\sigma$ остается неизменным. Нейтрино со спином, имеющим «неправильную» ориентацию, не существует. Поэтому при отражении пространственных координат необходимо допустить превращение нейтрино в антинейтрино, в соответствии с принципом комбинированной четности.

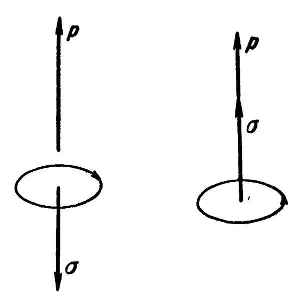


Рис. 28.

Гелл-Манн и Фейнман[1]) высказали гипотезу, что свойство спиральности имеет общий характер и является характеристикой всех фермионов, а не только нейтрино. Согласно этой гипотезе преобразование (123,6) должно иметь место для всех четырех фермионов, участвующих в процессе слабого взаимодействия (122,2). Это означает, что в общем выражении (122,5) операторы $\psi_C$, $\psi_D$, $\psi_A$ и $\psi_B$ должны быть заменены соответственно на операторы

$$\chi_C = \frac{1}{\sqrt{2}}(1+\gamma_5)\psi_C, \qquad \chi_A = \frac{1}{\sqrt{2}}(1+\gamma_5)\psi_A,$$

$$\chi_D = \frac{1}{\sqrt{2}}(1+\gamma_5)\psi_D, \qquad \chi_B = \frac{1}{\sqrt{2}}(1+\gamma_5)\psi_B.$$

Поясним это предположение. Отметим прежде всего, что операторы $\chi$ фактически являются двухкомпонентными. Через спиноры $w$ и $w'$, входящие в $\psi$, они выражаются аналогично (123,8),

$$\chi = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} w - w' \\ -(w - w') \end{pmatrix}.$$

Так как $\chi = \frac{1}{\sqrt{2}}(1+\gamma_5)\psi$, то, действуя на обе части равенства оператором $\frac{1}{\sqrt{2}m}\left[\gamma_\mu\left(\frac{\partial}{\partial x_\mu} - ieA_\mu\right) - m\right]$ и учитывая уравнение Дирака

$$\left[\gamma_\mu\left(\frac{\partial}{\partial x_\mu} - ieA_\mu\right) + m\right]\psi = 0,$$

получим

$$-\frac{1}{\sqrt{2}m}\left[\gamma_\mu\left(\frac{\partial}{\partial x_\mu} - ieA_\mu\right) - m\right]\chi = \psi. \tag{123,11}$$

Подставляя в уравнение Дирака $\psi$ в виде (123,11), получим уравнение второго порядка, которому удовлетворяет оператор $\chi$

$$\left[\left(\frac{\partial}{\partial x_\mu} - ieA_\mu\right)^2 + e\sigma_{\mu\nu}F_{\mu\nu} - m^2\right]\chi = 0, \tag{123,12}$$

где

$$\sigma_{\mu\nu} = -\frac{i}{2}(\gamma_\mu\gamma_\nu - \gamma_\nu\gamma_\mu)$$

и

$$F_{\mu\nu} = \frac{\partial}{\partial x_\mu}A_\nu - \frac{\partial}{\partial x_\nu}A_\mu.$$

Фейнман и Гелл-Манн предположили, что оператор $\chi$ является более фундаментальным, чем оператор $\psi$, и поэтому

[1]) R. Feynman, H. Gell-Mann, Phys. Rev. **109**, 193 (1958). [См. русский перевод ПСФ, вып. 4, стр. 3 (1958).]

гамильтониан взаимодействия (122,3) не должен содержать производных именно оператора $\chi$. Поэтому ввиду (123,11) в гамильтониан взаимодействия должен входить оператор $\chi$, а не $\psi$.

Такое предположение сразу приводит к тому, что из всех вариантов взаимодействия оказываются возможными лишь векторный и аксиально-векторный (с одинаковыми константами), а все остальные дают нуль.

Покажем, например, что обращается в нуль псевдоскалярный вариант

$$\hat{H}' = \frac{1}{4} g_5 \left(\overline{(1+\gamma_5)\psi_c}\,\gamma_5 (1+\gamma_5)\psi_A\right)\left(\overline{(1+\gamma_5)\psi_D}\,\gamma_5(1+\gamma_5)\psi_B\right) +$$
$$+ \frac{1}{4} g_5' \left(\overline{(1+\gamma_5)\psi_c}\,\gamma_5(1+\gamma_5)\psi_A\right)\left(\overline{(1+\gamma_5)\psi_D}\,(1+\gamma_5)\psi_B\right) + \text{э. с.},$$

но

$$\gamma_5(1+\gamma_5) = 1+\gamma_5.$$

Следовательно, оба члена идентичны. Далее,

$$\overline{(1+\gamma_5)\psi} = ((1+\gamma_5)\psi)^+ \gamma_4 = \psi^+ (1+\gamma_5)\gamma_4 = \bar{\psi}(1-\gamma_5).$$

Следовательно, в скобках появляются члены

$$(1-\gamma_5)(1+\gamma_5) = 1-\gamma_5^2 = 0.$$

Нуль дает также скалярный и тензорный варианты.

Учитывая, что

$$\gamma_5(1+\gamma_5) = (1+\gamma_5), \qquad (1+\gamma_5)^2 = 2(1+\gamma_5),$$

имеем для векторного и аксиально-векторного вариантов

$$\hat{H}' = \frac{1}{4}(g_2+g_2')\left[\bar{\psi}_C(1-\gamma_5)\gamma_\nu(1+\gamma_5)\psi_A\right]\left[\bar{\psi}_D(1-\gamma_5)\gamma_\nu(1+\gamma_5)\psi_B\right] +$$
$$+ \frac{1}{4}(g_4+g_4')\left[\bar{\psi}_C(1-\gamma_5)\gamma_\nu\gamma_5(1+\gamma_5)\psi_A\right] \times$$
$$\times \left[\bar{\psi}_D(1-\gamma_5)\gamma_\nu\gamma_5(1+\gamma_5)\psi_B\right] + \text{э. с.} =$$
$$= \frac{1}{4}(g_2+g_2'+g_4+g_4')\left[\bar{\psi}_C\gamma_\nu 2(1+\gamma_5)\psi_A\right]\left[\bar{\psi}_D\gamma_\nu 2(1+\gamma_5)\psi_B\right] + \text{э. с.} \equiv$$
$$\equiv f(\bar{\psi}_C\gamma_\nu(1+\gamma_5)\psi_A)(\bar{\psi}_D\gamma_\nu(1+\gamma_5)\psi_B) + \text{э. с.} \qquad (123,13)$$

Точно к такому же виду для гамильтониана четырехферментного взаимодействия пришли Сударшан и Маршак[1]), основываясь на тщательном анализе экспериментальных данных.

Гамильтониан взаимодействия (123,13) дает универсальный закон четырехфермионного взаимодействия с единой константой

[1]) Русский перевод работы см. ПСФ, вып. 2, стр. 3 (1959).

связи $f$. При анализе конкретных процессов с помощью гамильтониана (123,13) нужно учитывать также и так называемый закон сохранения лептонного заряда. Лептонами называются легкие частицы, принимающие участие в процессах со слабым взаимодействием, а именно: электроны $e^-$, $\mu^-$-мезоны, нейтрино $\nu$. Частицы $e^+$, $\mu^+$ и $\nu^+$ называются антилептонами. Лептонам приписывается лептонный заряд $+1$, антилептонам $-1$. Для остальных частиц, например, нуклонов, лептонный заряд полагается равным нулю. Полный лептонный заряд (алгебраическая сумма лептонных зарядов) должен в реакции сохраняться. Подробнее этот вопрос будет рассмотрен в гл. XV.

Рассмотрим, например, распад $\mu^-$-мезона

$$\mu^- \to e^- + \nu + \bar{\nu}. \qquad (123,14)$$

Распад с испусканием двух нейтрино (или антинейтрино), очевидно, запрещен законом сохранения лептонного заряда.

Гамильтониан взаимодействия (123,14) в соответствии с (123,13) имеет вид

$$\hat{H}' = f(\bar{\psi}_e \gamma_\mu (1+\gamma_5)\psi_\nu)(\bar{\psi}_\nu \gamma_\mu (1+\gamma_5)\psi_{\mu^-}) + \text{э. с.} \qquad (123,15)$$

Для процесса $\beta$-распада нейтрона соответственно имеем:

$$\hat{H}' = f(\bar{\psi}_e \gamma_\mu (1+\gamma_5)\psi_\nu)(\bar{\psi}_p \gamma_\mu (1+\gamma_5)\psi_n) + \text{э. с.} \qquad (123,16)$$

Зная гамильтониан взаимодействия, не представляет труда обычными методами теории возмущений определить вероятность соответствующего процесса. Универсальный закон четырехфермионного взаимодействия, предложенный Гелл-Манном — Фейнманом и Сударшаном — Маршаком, количественно подтвержден большим экспериментальным материалом.

ГЛАВА XIV

# НЕКОТОРЫЕ ВОПРОСЫ КВАНТОВОЙ ЭЛЕКТРОДИНАМИКИ

## § 124. Функция Грина уравнения Дирака

Развитая в гл. XIII теория взаимодействия нерелятивистских заряженных частиц с электромагнитным полем без труда обобщается на случай релятивистских частиц. Однако вычисления высших приближений теории возмущений (разложений по степеням $e^2/\hbar c$) приводили к расходящимся выражениям, физический смысл которых был неясен. Так, например, собственная энергия электрона, как и в классической электродинамике, оказывалась бесконечной. Поправки к эффективному сечению рассеяния, вычисленные во втором приближении теории возмущений, также оказывались не малыми, а бесконечно большими и т. д. Все это указывало на ограниченную область применимости расчетного аппарата квантовой электродинамики. Вместе с тем хорошее согласие с опытными данными эффективных сечений различных процессов, рассчитанных в первом неисчезающем приближении теории возмущений, указывало на правильность общих идей и методов теории.

Повышение точности экспериментальных методов исследования привело в последние годы к установлению новых фактов, не находивших объяснения в квантовой электродинамике. Именно, в 1947 г., кроме упомянутого открытия Лэмбом смещения уровней $2^2S_{1/2}$ и $2^2P_{1/2}$ атома водорода, которые по теории Дирака должны были бы совпадать, Раби установил, что величина магнитного момента электрона несколько отличается от магнетона Бора. Открытие этих явлений привело к дальнейшему интенсивному развитию квантовой электродинамики. Существенную роль в развитии теории сыграли работы Бете, Фейнмана, Дайсона, Швингера, Томонага и др. [1]). В частности,

[1]) Подробная библиография приведена в книге: С. Швебер, Г. Бете, Ф. Гофман, Мезоны и поля, т. I, ИЛ, 1957. Подробное изложение квантовой электродинамики см. также в книге: А. И. Ахиезер, В. Б. Берестецкий, Квантовая электродинамика, «Наука», 1969. С. Швебер, Введение в релятивистскую квантовую теорию поля, ИЛ, 1963. В. Б. Берестецкий, Е. М. Лифшиц, Л. П. Питаевский, Релятивистская квантовая теория, ч. I, «Наука», 1968.

Фейнманом был предложен новый расчетный метод, позволяющий существенно упростить все вычисления, а также придать им наглядный физический смысл [1]). В рамках этой книги мы можем изложить лишь самые общие основы метода Фейнмана. Детальное его изложение, а также многочисленные примеры применения метода Фейнмана к конкретным задачам могут быть найдены в указанных статьях и монографиях.

Основу расчетного аппарата теории Фейнмана составляет метод функции Грина. Мы перейдем теперь непосредственно к изложению методики, предложенной Фейнманом. Прежде всего запишем уравнения Дирака в более компактной и удобной для этих расчетов форме. Для этого введем оператор

$$\hat{\nabla} \equiv \sum_{\mu=1}^{4} \gamma_\mu \frac{\partial}{\partial x_\mu} \equiv \gamma_\mu \frac{\partial}{\partial x_\mu},$$

где

$$x_4 = ix_0 = it.$$

В этих обозначениях уравнение Дирака имеет вид [2])

$$(\hat{\nabla} + m)\psi = 0. \tag{124,1}$$

Аналогично тому, как это делалось в нерелятивистской теории для уравнения Шредингера (см. § 29), введем функцию Грина $K(2, 1)$ уравнения Дирака (124,1). Функция Грина $K(2,1)$ по определению удовлетворяет уравнению

$$(\hat{\nabla}_2 + m) K(2, 1) = \frac{1}{i} \delta^4 (2, 1). \tag{124,2}$$

Здесь и в дальнейшем цифры 1 и 2 означают совокупность четырех координат $x_\mu$, $\nabla_2$ — оператор, действующий на переменные $x_{2\mu}$. Символ $\delta^4(2, 1)$ обозначает четырехмерную $\delta$-функцию, равную

$$\delta^4(2, 1) = \delta^4(x_2 - x_1) = \delta(\boldsymbol{r}_2 - \boldsymbol{r}_1)\,\delta(t_2 - t_1). \tag{124,3}$$

Будем искать решение уравнения (124,1) в импульсном представлении. Иными словами, разложим функцию $K(2, 1)$ в интеграл Фурье

$$K(2, 1) = \int_{-\infty}^{\infty} S(p)\, e^{ip_\mu (x_{2\mu} - x_{1\mu})}\, d^4 p, \tag{124,4}$$

---

[1]) R. P. Feynman, Phys. Rev. **76** 749 (1949). Русский перевод см. в сборнике «Новейшее развитие квантовой электродинамики», ИЛ, 1954. См. также цитированные монографии.

[2]) Мы используем обозначения, несколько отличающиеся от введенных Фейнманом. Подобные обозначения приняты, например, в книге А. И. Ахиезера и В. Б. Берестецкого. Напомним также (см. сноску на стр. 496), что мы считаем в этой главе $\hbar = 1$, $c = 1$.

где
$$d^4p = d^3p\,dp_0 = dp_x\,dp_y\,dp_z\,dp_0 = dp_1\,dp_2\,dp_3\,dp_0.$$

$p_\mu$ — четырехмерный вектор импульса $p_4 = ip_0$. По индексу $\mu$ производится суммирование от 1 до 4. Чтобы не загромождать формулы индексами, мы в дальнейшем будем опускать индекс $\mu$, если это не может повести к недоразумениям. Разлагая также в интеграл Фурье $\delta^4$ (2,1) по формуле (см. приложение III)

$$\delta^4(2, 1) = \frac{1}{(2\pi)^4} \int\limits_{-\infty}^{\infty} e^{ip(x_2-x_1)}\,d^4p \qquad (124,5)$$

и подставляя в (124,2) выражения (124,4) и (124,5), находим

$$(\hat{\nabla}_2 + m) \int S(p)\,e^{ip(x_2-x_1)}\,d^4p = \frac{1}{(2\pi)^4 i} \int e^{ip(x_2-x_1)}\,d^4p. \qquad (124,6)$$

Действие оператора $(\hat{\nabla}_2 + m)$ дает

$$(\hat{\nabla}_2 + m)\,e^{ip(x_2-x_1)} = (i\hat{p} + m)\,e^{ip(x_2-x_1)}, \qquad (124,7)$$

где[1])

$$\hat{p} = p_\mu \gamma_\mu.$$

Приравнивая в (124,6) компоненты Фурье и учитывая (124,7) можно написать формальное решение для $S(p)$

$$S(p) = \frac{1}{(2\pi)^4}\frac{1}{i}\frac{1}{i\hat{p}+m} = \frac{-i}{(2\pi)^4}\frac{i\hat{p}-m}{(i\hat{p}+m)(i\hat{p}-m)} = \frac{i}{(2\pi)^4}\frac{i\hat{p}-m}{p^2+m^2}, \qquad (124,8)$$

где

$$\hat{p}^2 = \sum_{\mu,\,\nu} p_\mu p_\nu \gamma_\mu \gamma_\nu = \frac{1}{2}\sum_{\mu,\,\nu} (\gamma_\mu\gamma_\nu + \gamma_\nu\gamma_\mu)\,p_\mu p_\nu = \sum_\mu p_\mu p_\mu = p^2.$$

Мы воспользовались антикоммутативностью матриц $\gamma$. Для $K(2, 1)$ соответственно имеем

$$K(2, 1) = \frac{i}{(2\pi)^4} \int \frac{i\hat{p} - m}{p^2 + m^2}\,e^{ip(x_2-x_1)}\,d^4p, \qquad (124,9)$$

Последнее выражение удобно записать в виде

$$K(2, 1) = i(\hat{\nabla}_2 - m)\,I(2, 1), \qquad (124,10)$$

где $I(2, 1)$ — интеграл, зависящий только от обычных переменных, но не от матриц Дирака, и равный

$$I(2, 1) = \frac{1}{(2\pi)^4} \int \frac{e^{ip(x_2-x_1)}}{p^2+m^2}\,d^4p. \qquad (124,11)$$

---

[1]) Подчеркнем, что в этой главе знак $\wedge$ имеет другой смысл, чем в предыдущих главах книги.

Произведем интегрирование по переменной $p_0$:

$$I(2,\,1) = -\frac{1}{(2\pi)^4}\int e^{i\mathbf{p}(\mathbf{r}_2-\mathbf{r}_1)}\,d^3p\int\frac{e^{-ip_0(t_2-t_1)}}{p_0^2-E_p^2}\,dp_0,$$

где

$$E_p = +\sqrt{p^2+m^2}.$$

Если рассматривать $p_0$ как некоторую комплексную переменную, то интегрирование в плоскости этой комплексной переменной производится по всей вещественной оси. Однако подынтегральная функция имеет на этой оси полюса в точках $p_0 = E_p$ и $p_0 = -E_p$. Следовательно, для того чтобы интеграл (124,11) имел определенный смысл, необходимо задать правило обхода этих полюсов. Фейнманом было предложено следующее правило обхода: левый полюс обходится снизу, а правый сверху. Для выполнения такого обхода следует прибавить к массе $m$ бесконечно малую отрицательную мнимую часть, которую в окончательном результате следует устремить к нулю:

$$m \to m - i\delta, \qquad \delta > 0.$$

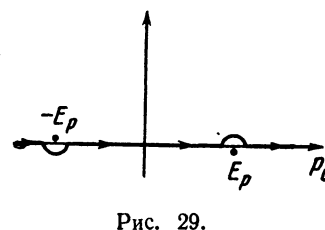


Рис. 29.

Действительно, при этом $E_p$ также получает бесконечно малую отрицательную мнимую добавку, и соответственно полюсы подынтегральной функции располагаются, как показано на рис. 29. Мы можем теперь произвести интегрирование, замыкая контур интегрирования бесконечно большой полуокружностью и вычисляя вычеты в соответствующих полюсах. Поскольку под знаком интеграла стоит экспоненциальная функция, контур интегрирования замыкается снизу при $t_2 > t_1$ и сверху при $t_2 < t_1$. Соответственно при $t_2 > t_1$ вычет берется в точке $p_0 = E_p$, а при $t_2 < t_1$ — в точке $p_0 = -E_p$. Таким образом, получаем:

$$I(2,\,1) = \frac{i}{16\pi^3}\int\frac{1}{E_p}\,e^{i(\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}_2-\mathbf{r}_1)-iE_p(t_2-t_1)}\,d^3p, \quad t_2 > t_1. \qquad (124,12)$$

$$I(2,\,1) = \frac{i}{16\pi^3}\int\frac{1}{E_p}\,e^{i(\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}_2-\mathbf{r}_1)+iE_p(t_2-t_1)}\,d^3p, \quad t_2 < t_1. \qquad (124,13)$$

Мы видим, что поскольку $E_p > 0$, то при $t_2 > t_1$ вклад дают лишь состояния с положительной энергией, а при $t_2 < t_1$ — соответственно лишь состояния с отрицательной энергией. Отметим, что полученный результат существенно отличается от имевшего место в нерелятивистской теории. Действительно, там функция Грина полагалась [ср. с (29,3)] равной нулю при $t_2 < t_1$. Аналогичное выражение мы получили бы и в релятивистском случае,

если бы оба полюса обходились сверху, что соответствует замене $p_0 \to p_0 + i\delta$ в подынтегральной функции.

Вычисление, аналогичное только что произведенному, показывает, что при такой замене времени $t_2 > t_1$ отвечало бы суммирование как по положительным, так и по отрицательным энергиям, а при $t_2 < t_1$ мы получили бы $I = 0$. Однако из дальнейшего будет видно, что использование функции Грина, предложенной Фейнманом и определяемой формулами (124,12), (124,13), является значительно более удобным.

С помощью введенной функции Грина можно построить решение уравнения Дирака, т. е. получить формулу, аналогичную нерелятивистскому соотношению (29,2). Проще всего для этой цели воспользоваться теоремой Гаусса в 4-пространстве ($d^4x = d^3x\,dt$)

$$i \int \frac{\partial F_\mu(x)}{\partial x_\mu} d^4x = \int_S F_\mu(x)\, n_\mu\, d\sigma(x), \qquad (124,13')$$

где $F$ — произвольный 4-вектор, $S$ — поверхность, охватывающая данный четырехмерный объем, а $n(x)$ — внешняя нормаль к этой поверхности в точке $x$. Полагая

$$F_\mu(x') = K(x - x')\,\gamma_\mu \psi(x'),$$

получим:

$$\frac{\partial F_\mu}{\partial x'_\mu} = \frac{\partial K(x-x')}{\partial x'_\mu}\gamma_\mu \psi(x') + K(x-x')\,\gamma_\mu \frac{\partial \psi(x')}{\partial x'_\mu} =$$

$$= -\frac{\partial K(x-x')}{\partial x_\mu}\gamma_\mu \psi(x') + K(x-x')\,\gamma_\mu \frac{\partial \psi(x')}{\partial x'_\mu}.$$

Из (124,10) следует, что

$$\frac{\partial K(x-x')}{\partial x_\mu}\gamma_\mu = \gamma_\mu \frac{\partial K(x-x')}{\partial x_\mu} = \hat{\nabla}_x K(x-x').$$

Воспользовавшись соотношениями (124,1), (124,2), получим

$$\frac{\partial F_\mu(x')}{dx'_\mu} = -(\hat{\nabla}_x + m)\,K(x-x')\,\psi(x') = i\delta^4(x-x')\,\psi(x').$$

Подставляя это выражение в выписанный выше четырехмерный интеграл и воспользовавшись (124,13'), получим

$$\psi(x) = -\int_S K(x-x')\,\gamma_\mu \psi(x')\, n_\mu(x')\, d\sigma(x').$$

Обозначая точку $x$ через точку 2, а точку $x'$ через точку 1, мы можем переписать полученное соотношение в виде

$$\psi(2)=\int_{t_1} K(2,1)\,\gamma_4\psi(1)\,d^3x_1-\int_{t'_1} K(2,1')\,\gamma_4\psi(1')\,d^3x_{1'}. \qquad (124{,}14)$$

Здесь в качестве поверхности интегрирования выбраны две бесконечные пространственноподобные плоскости $t=t_1$ и $t=t_{1'}$, причем $t_1<t_2<t_{1'}$. Интегрирование по времениподобным поверхностям можно опустить, так как они пространственно удалены от точки 2 сколь угодно далеко, а функция $K(2,1)$, как можно показать, в пространственноподобных направлениях экспоненциально убывает до нуля при неограниченном возрастании пространственных расстояний [1]).

Функция $K(2,1)$ содержит суммирование только по состояниям с положительной энергией, а функция $K(2,1')$, при $t_2<t'_1$ — лишь по состояниям с отрицательной энергией. Поэтому первый интеграл в (124,14) отличен от нуля для компонент $\psi(1)$, отвечающих частицам с положительной энергией, а второй интеграл соответственно не равен нулю для компонент $\psi(1')$, отвечающих частицам с отрицательной энергией.

Мы видим, что волновая функция частицы в точке 2 четырехмерного пространства определяется функцией Грина и значениями $\psi(1)$ и $\psi(1')$. Аналогичным образом, полагая $F_\mu=\bar\psi(x')\gamma_\mu K(x'-x)$, легко найти выражения для функции $\bar\psi(2)$:

$$\bar\psi(2)=\int_{t'_1>t_2}\bar\psi(1')\,\gamma_4K(1',2)\,d^3x_{1'}-\int_{t_1<t_2}\bar\psi(1)\,\gamma_4K(1,2)\,d^3x_1, \qquad (124{,}15)$$

где функция $\bar\psi(x)=\psi^+(x)\gamma_4$ и удовлетворяет уравнению

$$\frac{\partial\bar\psi}{\partial x_\mu}\gamma_\mu-m\bar\psi=0$$

или

$$\bar\psi(\hat\nabla-m)=0.$$

При такой форме записи оператор $\hat\nabla$ действует на функции, стоящие слева от него.

Компоненты волновой функции, отвечающие отрицательным энергиям $E$, трактуются в теории Фейнмана как амплитуды вероятности нахождения частицы в позитронном состоянии, т. е. в состоянии с положительной энергией $+E$ и зарядом $+e$. Таким образом, функция $\psi(2)$ является заданной, если известна амплитуда электронного сотояния $\psi(1)$ в момент $t_1<t_2$ и амплитуда позитронного состояния $\psi(1')$ в момент $t_{1'}>t_2$.

---

[1]) См. работу Фейнмана (ссылка на стр. 504).

Фазовый множитель, входящий в функцию $K(2, 1)$, при $t_2 < t_1$ зависит от времени по закону $e^{iE_p(t_2-t_1)} = e^{-iE_p|t_2-t_1|}$ [см. (124,13)]. Иными словами, временной множитель у функции $K(2, 1')$ зависит от $(t_2 - t_{1'})$ так же, как фазовый множитель волновой функции, отвечающей частицам с положительной энергией. В соответствии с этим позитронные состояния можно рассматривать как состояния частицы с положительной энергией, но распространяющейся в обратном направлении по оси времени. Этому соответствует то обстоятельство, что состояние позитрона должно быть задано в момент времени $t_{1'} > t_2$ [второй интеграл в формуле (124,14)].

Предположим теперь, что имеется внешнее электромагнитное поле. В наших обозначениях уравнение Дирака в этом случае запишется в виде

$$(\hat{\nabla} - ie\hat{A} + m)\psi = 0, \qquad (124,16)$$

где $\hat{A} = A_\mu \gamma_\mu$, $A_4 = i\varphi$ ($\varphi$ — скалярный потенциал).

Функция Грина, как обычно, определяется уравнением

$$(\hat{\nabla}_x - ie\hat{A} + m) K^A(x - x') = -i\delta(x - x').$$

Функция $K^A(2, 1)$, так же как и функция $K(2, 1)$, содержит в своем разложении только компоненты, отвечающие положительным энергиям при $t_2 > t_1$ и отрицательным энергиям при $t_2 < t_1$. Соотношения (124,14) и (124,15) остаются в силе, если только заменить в них $K(2, 1)$ на $K^A(2, 1)$.

Так же как и в нерелятивистском случае, можно сформулировать интегральное уравнение, которому удовлетворяет функция $K^A(2,1)$. Именно,

$$K^A(2, 1) = K(2, 1) - e\int K(2, 3)\hat{A}(3) K^A(3, 1)\, d^4x_3. \qquad (124,17)$$

Вывод интегрального уравнения (124,17) не отличается от вывода интегрального уравнения (29,17). Как мы уже выяснили в § 58, уравнение такого типа удобно решать методом последовательных приближений [см. (58,5)].

## § 125. Функция Грина для системы из двух частиц

Найденное выше выражение для волновой функции одной частицы необходимо обобщить на случай системы взаимодействующих частиц. Простейшим примером такой системы является система, состоящая из двух частиц, связанных между собой взаимодействием электромагнитного характера. Заметим прежде всего, что функция Грина системы двух невзаимодействующих частиц равна произведению функции Грина каждой

из частиц:

$$K(3,\ 4;\ 1,\ 2) = K_a(3,\ 1)\, K_b(4,\ 2). \tag{125,1}$$

Здесь $K_a(3,1)$ — функция Грина свободной частицы $a$, распространяющейся из точки *1* в точку *3*. Аналогичный смысл имеет величина $K_b(4,2)$ для частицы $b$.

В случае системы двух взаимодействующих частиц функция Грина, даваемая формулой (125,1), может рассматриваться как нулевое приближение по взаимодействию. Найдем теперь функцию Грина $K^{(1)}(3,4;\ 1,2)$ в первом приближении по взаимодействию. Именно, будем рассматривать две заряженные частицы, которые описываются уравнением Дирака. Для того чтобы написать оператор взаимодействия, удобно, следуя Фейнману, сначала рассмотреть нерелятивистское приближение, а затем провести соответствующее обобщение на случай релятивистских частиц. В нерелятивистском приближении взаимодействие между частицами описывается законом Кулона, а функция $K^{(1)}(3,4;\ 1,2)$ по аналогии с формулой (58,3) определяется соотношением

$$K^{(1)}(3\ 4;\ 1,\ 2) = \\ = -ie^2 \int K_a(3,\ 5)\, K_b(4,\ 6)\, \frac{1}{r_{56}}\, \delta(t_{56})\, K_a(5,\ 1)\, K_b(6,\ 2)\, dx_5^4\, dx_6^4, \tag{125,2}$$

где $r_{56} = |\boldsymbol{r}_5 - \boldsymbol{r}_6|$. Смысл выражения для $K^{(1)}(3,4;\ 1,2)$ легко понять, если сопоставить ему некоторую диаграмму (рис. 30), которая трактуется следующим образом. Частица $a$ распространяется из точки *1* в точку *3*, проходя через промежуточную точку *5*. Линия *2—6—4* описывает распространение частицы $b$. Линии *1—5* на диаграмме соответствует функция распространения $K_a(5,1)$, а линия *2—6* — соответственно функциям $K_b(6,2)$. В точках *5* и *6* осуществляется взаимодействие между частицами. Пунктир соответствует выражению $\frac{e^2}{r_{56}}\,\delta(t_{56})$, где $r_{56} = |\boldsymbol{r}_5 - \boldsymbol{r}_6|$ — пространственное расстояние между точками *5* и *6*, а $t_{56} = t_5 - t_6$, где $t_5$ и $t_6$ — моменты времени, в которые частицы $a$ и $b$ попадают в точки *5* и *6*. Дельта-функция временнóго аргумента означает, что в нерелятивистском приближении следует пренебрегать запаздыванием и рассматривать частицы, находящиеся в точке *5* и *6* в один и тот же момент времени $t = t_5 = t_6$. Линии *5—3* и *6—4* соответствуют движению свободных частиц после взаимодействия (функции $K_a(3,5)$, $K_b(4,6)$ в (125,2)).

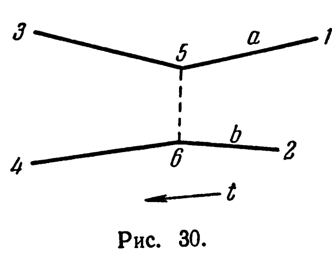


Рис. 30.

Обобщение выражения (125,2) на релятивистский случай включает прежде всего учет запаздывания взаимодействия. На первый взгляд может показаться, что для этого следует заменить $\delta(t_{56})$ на $\delta(t_{56}-r_{56})$, где $r_{56}$ определяет время запаздывания (в наших обозначениях — скорость распространения взаимодействия $c=1$). Однако подобная замена была бы неправильной. Действительно, электромагнитное взаимодействие представляет обмен фотонами, обладающими положительной энергией. Между тем разложение $\delta$-функции в интеграл Фурье содержит как положительные, так и отрицательные частоты. Поэтому для перехода от кулоновского взаимодействия к релятивистскому обобщению с учетом запаздывания следует заменить $\delta$-функцию на функцию $\delta_+$, определенную соотношением

$$\delta_+(x)=\lim_{\varepsilon\to 0}\int_0^\infty e^{-i\omega(x-i\varepsilon)}\frac{d\omega}{\pi}=\lim_{\varepsilon\to 0}\frac{1}{x-i\varepsilon}\frac{1}{\pi i}. \qquad (125,3)$$

Определенный таким образом аналог $\delta$-функции содержит разложение лишь по положительным частотам. Так как $t_{56}$ принимает как положительные, так и отрицательные значения, то берется симметризованная комбинация

$$\frac{1}{2r_{56}}\left(\delta_+\left(t_{56}-r_{56}\right)+\delta_+\left(-t_{56}-r_{56}\right)\right)=\delta_+\left(t_{56}^2-r_{56}^2\right)=\delta_+\left(-x_{56}^2\right).$$

Приведенное равенство сразу находится с помощью формулы (125,3).

Кроме того, нужно учесть, что если частицы движутся, то существует, помимо кулоновского, электромагнитное взаимодействие [см. (25,27), ч. II]. Это приводит к тому, что взаимодействие определяется выражением

$$\left(1-\boldsymbol{v}_5\boldsymbol{v}_6\right)e^2\delta_+\left(-x_{56}^2\right).$$

Оператор взаимодействия мы получим, если заменим векторы скорости $\boldsymbol{v}_5$, $\boldsymbol{v}_6$ на операторы $\boldsymbol{\alpha}_a$, $\boldsymbol{\alpha}_b$, причем каждый из операторов действует соответственно на переменные $a$-й и $b$-й частиц[1]). Тогда для оператора взаимодействия в релятивистском случае можно в силу (113,14) написать:

$$\left(1-\boldsymbol{\alpha}_a\boldsymbol{\alpha}_b\right)e^2\delta_+\left(-x_{56}^2\right)=e^2\beta_a\beta_b\gamma_{a\mu}\gamma_{b\mu}\delta_+\left(-x_{56}^2\right).$$

Нам осталось для получения окончательного выражения функции $K^{(1)}(3,4;\ 1,2)$ установить связь между релятивистскими

[1]) Действительно оператор скорости легко может быть найден по формуле $\boldsymbol{v}=[\hat{H},\boldsymbol{r}]$. Но $\hat{H}$ [см. (113,7)] равен $\hat{H}=\frac{1}{i}\boldsymbol{\alpha}\nabla+\beta m$ и коммутируя, мы получаем $[\hat{H},\boldsymbol{r}]=\boldsymbol{\alpha}$.

и нерелятивистскими функциями Грина. Для этого сравним формулы (29,3) и (124,14). Мы видим, что имеет место соответствие

$$K_{\text{нерелят}} \to K_{\text{релят}}\beta.$$

Таким образом, для частиц, описываемых уравнением Дирака, имеем:

$$K^{(1)}(3, 4;\ 1, 2)\beta_a\beta_b = -ie^2 \int K_a(3, 5) K_b(4, 6) \gamma_{a\mu}\gamma_{b\mu}\delta_+\left(-x_{56}^2\right) \times \\ \times K_a(5, 1) K_b(6, 2)\beta_a\beta_b\, d^4x_5\, d^4x_6. \quad (125,4)$$

Умножая (125,4) справа на $\beta_a\beta_b$, находим окончательно:

$$K^{(1)}(3, 4;\ 1, 2) = -ie^2 \int K_a(3, 5) K_b(4, 6) \gamma_{a\mu}\gamma_{b\mu}\delta_+\left(-x_{56}^2\right) \times \\ \times K_a(5, 1) K_b(6, 2)\, d^4x_5\, d^4x_6 = \\ = e^2 \int K_a(3, 5) K_b(4, 6) \gamma_{a\mu} D\left(-x_{56}^2\right) \gamma_{b\mu} K_a(5,1) K_b(6, 2)\, d^4x_5\, d^4x_6. \quad (125,5)$$

Функцию $D\left(-x_{56}^2\right) = -i\delta_+\left(-x_{56}^2\right)$ обычно называют функцией распространения виртуального фотона. Итак, мы видим, что с учетом релятивистских эффектов диаграмму рис. 30 можно трактовать следующим образом. Функции $K$ отвечают сплошным (электронным) линиям, функция $D$ — пунктирной линии, а вершинам отвечают матрицы $e\gamma_{a\mu}$, $e\gamma_{b\mu}$.

Все расчеты в теории Фейнмана существенно упрощаются, если их проводить в импульсном представлении. Вид функции $K$ в $p$-представлении дается формулой (124,8). Таким образом, остается определить компоненту Фурье функции $\delta_+$. Покажем, что имеет место следующее соотношение:

$$\delta_+\left(-x^2\right) = \frac{1}{4\pi^3} \int \frac{e^{ikx}}{k^2 - i\varepsilon}\, d^4k, \quad (125,6)$$

где $\varepsilon$ — бесконечно малая величина. Она определяет правило обхода полюсов. В правильности соотношения (125,6) убедимся, непосредственно вычисляя интеграл, стоящий справа:

$$\int \frac{e^{ikx}}{k^2 - i\varepsilon}\, d^4k = \int e^{i\mathbf{kr}}\, d^3k \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-ik_0x_0}}{\mathbf{k}^2 - k_0^2 - i\varepsilon}\, dk_0.$$

Предположим, например, что $x_0 > 0$. Замыкая контур интегрирования снизу и находя вычеты, получаем

$$2\pi i \int \frac{e^{i\mathbf{kr}}}{2\,|\mathbf{k}|}\, e^{-ik|x_0|}\, d^3k.$$

Представляя $d^3k$ в виде $k^2\, dk\, d\Omega$ и интегрируя по углам, получаем с учетом (125,3) искомое соотношение.

## § 126. Диаграммы Фейнмана

Мы рассмотрим теперь правила вычисления вероятностей перехода из одного состояния в другое с помощью расчетного аппарата, приведенного в предыдущих параграфах. Для простоты рассмотрим сначала одну частицу (например, электрон, которая переходит из одного состояния в другое под действием внешнего электромагнитного поля. Пусть электрон в начальный момент времени $t = t_1$ находится в состоянии $\psi(\mathbf{r}_1, t_1) = \psi(1)$, а в момент времени $t = t_2$ — в состоянии $\psi(\mathbf{r}_2, t_2) = \psi(2)$, отвечающем положительной энергии. Вероятность перехода в некоторое состояние $\psi_n(\mathbf{r}_2, t_2)$, как всегда; определяется квадратом модуля соответствующей амплитуды разложения функции $\psi(\mathbf{r}_2, t_2)$ по функциям $\psi_n(\mathbf{r}_2, t_2)$:

$$M = \int \psi_n^+(\mathbf{r}_2, t_2)\, \psi(\mathbf{r}_2, t_2)\, d^3x_2. \qquad (126,1)$$

Выражая функцию $\psi(\mathbf{r}_2, t_2)$ через функцию Грина по формуле (124,14), получаем

$$M = \int \psi_n^+(\mathbf{r}_2, t_2)\, K^A(\mathbf{r}_2, t_2; \mathbf{r}_1, t_1)\, \beta\psi(\mathbf{r}_1, t_1)\, d^3x_1\, d^3x_2.$$

Вместо функции Грина $K^A$ можно написать ее разложение в ряд последовательных приближений. При этом получим выражение для амплитуды перехода $M$ в виде ряда теории возмущений. Так, например, амплитуда перехода в первом приближении теории возмущений равна

$$M^{(1)} = -e \int \psi_n^+(2)\, K(2, 3)\, \hat{A}(3)\, K(3, 1)\, \beta\psi(1)\, d^3x_1\, d^3x_2\, d^4x_3. \qquad (126,2)$$

Это выражение можно представить в более компактном виде, используя соотношения

$$\psi(3) = \int K(3, 1)\, \beta\psi(1)\, d^3x_1, \quad \bar{\psi}_n(3) = \int \bar{\psi}_n(2)\, \beta K(2, 3)\, d^3x_2.$$

Тогда для амплитуды перехода имеем

$$M^{(1)} = -e \int \bar{\psi}_n(3)\, \hat{A}(3)\, \psi(3)\, d^4x_3. \qquad (126,3)$$

Аналогичным образом легко получить второе приближение амплитуды перехода

$$M^{(2)} = (-e)^2 \int \bar{\psi}_n(3)\, \hat{A}(3)\, K(3, 4)\, \hat{A}(4)\, \psi(4)\, d^4x_3\, d^4x_4. \qquad (126,4)$$

Если начальное и конечное состояния описываются плоскими волнами, то формулы (126,3) и (126,4) удобно переписать

в импульсном представлении. Полагая

$$\bar{\psi}_n(3) = \bar{u}(\boldsymbol{p}_2)\, e^{-ip_2x_3}, \qquad \psi(3) = u(\boldsymbol{p}_1)\, e^{ip_1x_3}$$

и используя фурье-представление оператора $\hat{A}$

$$\hat{A}(3) = \int \hat{a}(k)\, e^{ikx_3}\, d^4k, \tag{126,5}$$

получаем для амплитуды перехода первого порядка (126,3):

$$M^{(1)} = -e \int d^4x_3 \int e^{-ip_2x_3+ikx_3+ip_1x_3}\bar{u}(\boldsymbol{p}_2)\,\hat{a}(k)\,u(\boldsymbol{p}_1)\,d^4k =$$

$$= -e(2\pi)^4 \int \bar{u}(\boldsymbol{p}_2)\,\hat{a}(k)\,\delta^4(k+p_1-p_2)\,u(\boldsymbol{p}_1)\,d^4k =$$

$$= -e(2\pi)^4\,\bar{u}(\boldsymbol{p}_2)\,\hat{a}(p_2-p_1)\,u(\boldsymbol{p}_1). \tag{126,6}$$

Для амплитуды перехода второго порядка соответственно имеем:

$$M^{(2)} = (-e)^2 \int \bar{u}(\boldsymbol{p}_2)\,\hat{a}(k_1)\,S(p)\,\hat{a}(k)\,u(\boldsymbol{p}_1)\,d^4p\,d^4k\,d^4k_1 \times$$

$$\times \int e^{-ip_2x_3+ik_1x_3+ip(x_3-x_4)+ikx_4+ip_1x_4}\,d^4x_3\,d^4x_4 =$$

$$= e^2(2\pi)^8 \int \bar{u}(\boldsymbol{p}_2)\,\hat{a}(k_1)\,\delta^4(k_1+p-p_2)\,S(p)\,\hat{a}(k)\,\delta^4(p_1+k-p)\,u(p_1)\times$$

$$\times d^4p\,d^4k\,d^4k_1 = e^2(2\pi)^8 \int \bar{u}(\boldsymbol{p}_2)\,\hat{a}(p_2-p_1-k)\,\frac{1}{i(2\pi)^4\,[i(\hat{p}_1+\hat{k})+m]}\times$$

$$\times\,\hat{a}(k)\,u(\boldsymbol{p}_1)\,d^4k. \tag{126,7}$$

Формулами (126,6) и (126,7) можно сопоставить наглядные схемы, получившие название диаграмм Фейнмана. Как будет пояснено ниже, каждой линии и каждому пересечению линий (именуемому вершиной) на диаграмме Фейнмана отвечает определенный множитель в амплитуде перехода. В случае сложных процессов подобные диаграммы позволяют упростить построение выражений для амплитуд переходов.

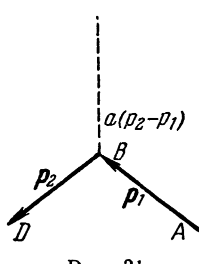


Рис. 31.

Будем изображать на диаграмме Фейнмана состояния электронов и позитронов сплошными линиями, состояния электромагнитного поля — пунктирными линиями. Стрелки на линиях показывают последовательность написания членов в амплитуде перехода. Возрастанию времени отвечает движение частицы по линии справа налево.

Рассмотрим простейшую диаграмму Фейнмана (рис. 31), отвечающую следующему процессу: электрон с импульсом $\boldsymbol{p}_1$ рассеялся на внешнем электромагнитном поле и перешел в новое

состояние с импульсом $\boldsymbol{p}_2$. Амплитуда вероятности этого перехода дается формулой (126,6). На рис. 31 свободный электрон с импульсом $\boldsymbol{p}_1$ изображен сплошной прямой $AB$. Этой прямой в амплитуде перехода $M^{(1)}$ отвечает первый множитель (множители нумеруются справа налево) — биспинор $u(\boldsymbol{p}_1)$. В точке $B$ электрон рассеивается на электромагнитном поле, изображенном пунктирной линией. Пересечению сплошной и пунктирной линии (вершине) на диаграмме Фейнмана в амплитуде перехода $M^{(1)}$ отвечает оператор $-e\hat{a}(k)$, умноженный на $\delta$-функцию от импульсов всех трех частиц. Электрон с импульсом $\boldsymbol{p}_2$ изображен прямой $BD$. В амплитуде $M^{(1)}$ ему отвечает биспинор $\bar{u}(\boldsymbol{p}_2)$.

Мы видим, что порядок процесса по заряду $e$ определяется числом вершин на диаграмме Фейнмана. Это особенно ясно видно из рассмотрения диаграммы Фейнмана для процесса второго порядка (рис. 32). Эта диаграмма отвечает процессу рассеяния электрона во втором приближении теории возмущений. Линия $AB$ (именуемая внешней линией) изображает движение свободного электрона. Ей соответствует биспинор $u(\boldsymbol{p}_1)$ в амплитуде перехода $M^{(2)}$. В вершине $B$ происходит рассеяние электрона. В амплитуде перехода $M^{(2)}$ вершине $B$ отвечает множитель $-e\hat{a}(k)$ и $\delta$-функция от импульсов $\delta^4(p_1 + k - p)$. Линия $BC$, соединяющая две вершины, называется внутренней линией. Ей в $M^{(2)}$ соответствует множитель $S$ — фурье-компонента функции Грина, определенная формулой (124,8). В вершине $C$ действует внешнее поле. Вершине $C$ соответствует в $M^{(2)}$ оператор $-e\hat{a}(k_1)$ и $\delta$-функция $\delta^4(k_1 + p - p_2)$. Внешняя линия $CD$ изображает движение электрона с импульсом $\boldsymbol{p}_2$. Линии $CD$ в $M^{(2)}$ отвечает биспинор $\bar{u}(\boldsymbol{p}_2)$. Поскольку закон сохранения 4-импульса при переходе из состояния $\boldsymbol{p}_1$ в состояние $\boldsymbol{p}_2$ выполняется при произвольном значении волнового вектора $k$, то по вектору $k$ (или $k_1$) производится интегрирование. Величина числового множителя в выражении для амплитуды определяется числом входящих в нее $\delta$-функций, равным числу вершин. Каждая вершина вносит в $M^{(2)}$ множитель $(2\pi)^4$.

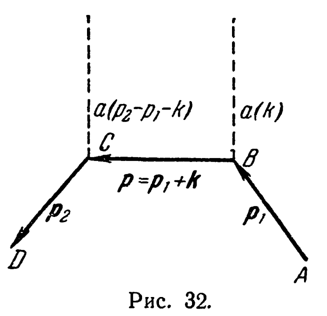


Рис. 32.

Совершенно таким же образом может быть построена диаграмма Фейнмана для процессов, происходящих с участием позитронов. Например, диаграмма рис. 32 описывает также рассеяние позитрона во втором приближении теории возмущений. Так как в теории Фейнмана позитрон рассматривается как электрон, движущийся обратно во времени, то эта диаграмма

определяет амплитуду перехода позитрона из состояния с импульсом $-\mathbf{p}_2$ в состояние с импульсом $-\mathbf{p}_1$. Для вершины $M^{(2)}$ в этом случае имеем

$$M^{(2)} = \frac{1}{i} e^2 (2\pi)^4 \int \bar{v}(\mathbf{p}_2)\, \hat{a}(p_2 - p_1 - k) \frac{1}{i(\hat{p}_1 + \hat{k}) + m} \hat{a}(k)\, v(\mathbf{p}_1)\, d^4k. \tag{126,8}$$

Здесь $v$ — биспинор Дирака, отвечающий состоянию с отрицательной энергией.

Помимо процессов рассеяния во внешнем электромагнитном поле, выведенные соотношения дают возможность рассмотреть процессы, связанные с излучением и поглощением свободных фотонов. Для этого в общих формулах (126,3) и (126,4) оператор $\hat{A}$ должен соответствовать полю одного излученного или одного поглощенного фотона. В согласии с формулами (102,3) (102,5) полю излученного фотона отвечает вектор-потенциал

$$A_\mu = \sqrt{\frac{2\pi}{\omega}}\, e_\mu e^{-ikx}, \tag{126,9}$$

а поглощенному фотону соответственно

$$A_\mu = \sqrt{\frac{2\pi}{\omega}}\, e_\mu e^{ikx}. \tag{126,10}$$

Здесь $e_\mu$ — вектор поляризации, а $k$ означает четырехмерный волновой вектор. Так как поглощается или излучается только один фотон, то матричные элементы операторов $\hat{a}$ и $\hat{a}^+$ равны единице. Диаграммы, изображенные на рис. 33, описывают процессы с участием двух свободных фотонов. Так, например, эти диаграммы описывают процесс комптоновского рассеяния, т. е. рассеяния фотона на свободном электроне. В этом процессе фотон до рассеяния имел волновой вектор $\mathbf{k}_1$, а после рассеяния $-\mathbf{k}_2$. На диаграмме рис. 33, *а* соответствует тому, что фотон сначала поглощается, а затем испускается электроном. Этому же процессу отвечает и диаграмма рис. 33, *б*, когда сначала испускается фотон $\mathbf{k}_2$, а затем поглощается фотон $\mathbf{k}_1$. Разумеется, слова «сначала» и «затем» относятся лишь к порядку написания множителей в амплитуде перехода и не имеют какого-либо другого физического смысла.

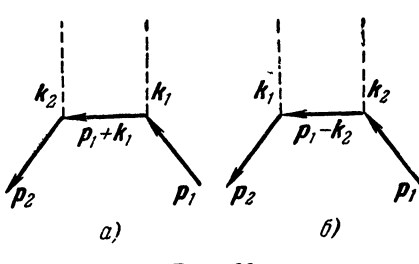


Рис. 33.

Диаграммы Фейнмана, изображенные на рис. 33, позволяют сразу написать амплитуду перехода, не делая каждый раз спе-

циальных вычислений такого типа, какие делались при выводе формул (126,6) и (126,7). Полная амплитуда перехода определяется суммой амплитуд, отвечающих диаграммам 33, *а* и 33, *б*. Она имеет вид

$$M = \frac{e^2}{i}(2\pi)^4 \left[ \bar{u}(\boldsymbol{p}_2) \sqrt{\frac{2\pi}{\omega_2}}\,\hat{e}_2 \frac{1}{i(\hat{p}_1 + \hat{k}_1) + m} \sqrt{\frac{2\pi}{\omega_1}}\,\hat{e}_1 u(\boldsymbol{p}_1) + \right.$$
$$\left. + \bar{u}(\boldsymbol{p}_2) \sqrt{\frac{2\pi}{\omega_1}}\,\hat{e}_1 \frac{1}{i(\hat{p}_1 - \hat{k}_2) + m} \sqrt{\frac{2\pi}{\omega_2}}\,\hat{e}_2 u(\boldsymbol{p}_1) \right] \delta^4(p_1 + k_1 - p_2 - k_2), \tag{126,11}$$

где $\hat{e}_1 = e_{1\mu}\gamma_\mu$; $\hat{e}_2 = e_{2\mu}\gamma_\mu$, а $e_{1\mu}$ и $e_{2\mu}$ — векторы поляризации фотона до и после рассеяния.

Появление $\delta$-функции легко понять, если учесть, что в данном случае в выражении типа (126,4) вместо оператора внешнего поля вида (126,5) подставляются выражения типа (126,9) и (126,10), не содержащие интегрирования по $k$. Таким образом, в выражении типа (126,7) будет отсутствовать интегрирование по $k$ и $k_1$. После интегрирования по $p$ остается одна $\delta$-функция, выражающая закон сохранения энергии и импульса при комптон-процессе.

Диаграммы такого же типа описывают, например, процесс аннигиляции электрона с импульсом $\boldsymbol{p}_1$ и позитрона с импульсом $-\boldsymbol{p}_2$. При аннигиляции образуется два фотона с импульсами $\boldsymbol{k}_1$ и $\boldsymbol{k}_2$ (рис. 34). Амплитуда двухфотонной аннигиляции пары по тем же правилам запишется в виде

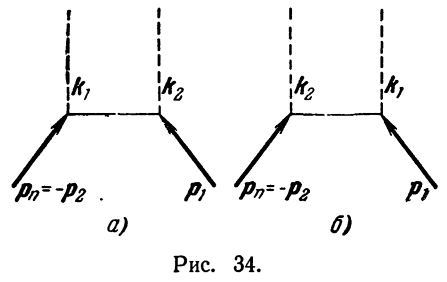


Рис. 34.

$$M = \frac{1}{i} e^2 (2\pi)^5 \frac{1}{\sqrt{\omega_1\omega_2}} \times$$
$$\times \left\{ \bar{v}(\boldsymbol{p}_2) \left[ \hat{e}_1 \frac{1}{i(\hat{p}_1 - \hat{k}_2) + m} \hat{e}_2 + \hat{e}_2 \frac{1}{i(\hat{p}_1 - \hat{k}_1) + m} \hat{e}_1 \right] u(\boldsymbol{p}_1) \right\} \times$$
$$\times \delta^4(p_1 - p_2 - k_1 - k_2). \tag{126,12}$$

В качестве другого примера рассмотрим тормозное излучение электрона, т. е. излучение, возникающее при пролете быстрого электрона в поле ядра. Диаграмма, отвечающая этому процессу, представлена на рис. 35.

Электрон с импульсом $\boldsymbol{p}_1$, рассеиваясь на внешнем поле $a$, излучает фотон импульса $\boldsymbol{k}$ и поляризации $\boldsymbol{e}$ и переходит в состояние с импульсом $\boldsymbol{p}_2$. При этом возможны два процесса, изображенные на диаграммах рис. 35, *а* и *б*.

Полная амплитуда перехода, в соответствии с изложенными правилами, имеет вид

$$M = \frac{e^2}{i} \frac{(2\pi)^{9/2}}{\sqrt{\omega}} \bar{u}(p_2) \left[ \hat{a}(p_2 - p_1 + k) \frac{1}{i(\hat{p}_1 - \hat{k}) + m} \hat{e} + \right.$$

$$\left. + \hat{e} \frac{1}{i(\hat{p}_2 + \hat{k}) + m} \hat{a}(p_2 + k - p_1) \right] u(p_1). \quad (126,13)$$

Рассмотрим теперь процессы, связанные с взаимодействием двух частиц, например, рассеяние электрона на $\mu$-мезоне. Амплитуда перехода вычисляется опять разложением волновой

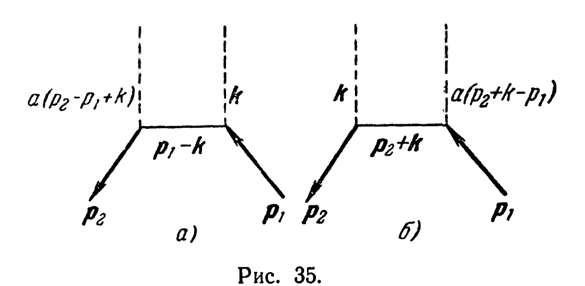



Рис. 35.

функции системы по произведениям волновых функций свободных частиц. Волновая функция системы двух частиц определяется функцией Грина (125,5). Эти вычисления приводят к графикам, которые строятся по тем же принципам, что и для случая одной частицы. В первом приближении теории возмущений процессу рассеяния соответствует диаграмма Фейнмана, изображенная на рис. 36.

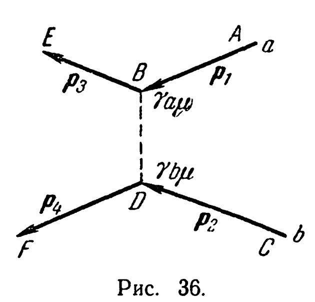



Рис. 36.

Здесь сплошные линии $AB$ и $CD$ соответствуют движению свободных частиц с импульсами $p_1$ и $p_2$. Электромагнитное взаимодействие между частицами сводится к обмену фотонами. В вершине $B$ происходит излучение виртуального фотона, который поглощается второй частицей (вершина $D$). Линии $BE$ и $DF$ отвечают движению частиц после взаимодействия с импульсами $p_3$ и $p_4$. Амплитуда перехода составляется по тем же правилам и имеет вид

$$M = e^2 (2\pi)^8 \bar{u}_a(p_3) \bar{u}_b(p_4) \gamma_{a\mu} D_f(p_1 - p_3) \times$$

$$\times \gamma_{b\mu} u_a(p_1) u_b(p_2) \delta^4(p_3 + p_4 - p_1 - p_2). \quad (126,14)$$

Здесь $D_f$ — компонента Фурье функции распространения виртуального фотона $D$, которая согласно (125,5) и (125,6) дается формулой

$$D_f(k) = -\frac{i}{4\pi^3}\frac{1}{k^2}. \qquad (126,15)$$

Остановимся кратко на поправках, которые возникают в высших приближениях теории возмущений. Диаграммы, отвечающие этим поправкам, естественно, должны содержать большее число вершин по сравнению с соответствующей основной диаграммой (каждой вершине отвечает параметр малости $e$). Именно числом вершин и определяется порядок малости рассматриваемой поправки.

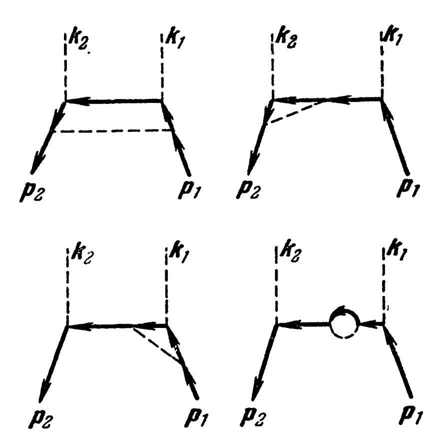


Рис. 37.

Рассмотрим, например, диаграммы, отвечающие следующему приближению к теории комптон-эффекта. Как легко понять, диаграмме рис. 33, *а* соответствуют поправки на рис. 37. Аналогично и для диаграммы рис. 33, *б*. Все эти диаграммы отличаются от исходной диаграммы (см. рис. 33) наличием внутренней фотонной линии. Эта линия отвечает, как мы уже видели, излучению и поглощению виртуального кванта. Поэтому эти поправки обычно называются радиационными. Вычисление этих поправок связано с определенными трудностями и потребовало разработки так называемого метода перенормировок. Мы не будем останавливаться на этих вопросах¹).

## § 127. Комптон-эффект

Для иллюстрации техники расчета эффективных сечений в теории Фейнмана рассмотрим подробнее теорию комптон-эффекта. Амплитуда перехода для этого процесса была уже получена с помощью диаграммы Фейнмана (см. рис. 33) и имела вид (126,11). Выделяя $\delta$-функцию, напишем амплитуду перехода в виде

$$M = M_{21}\delta^4(p_1 + k_1 - p_2 - k_2), \qquad (127,1)$$

¹) См., например, А. И. Ахиезер и В. Б. Берестецкий, Квантовая электродинамика, «Наука», 1969.

где

$$M_{21} = ie^2 \frac{(2\pi)^5}{\sqrt{\omega_1\omega_2}} \bar{u}(p_2) \left[ \hat{e}_2 \frac{i(\hat{p}_1 + \hat{k}_1) - m}{(\hat{p}_1 + \hat{k}_1)^2 + m^2} \hat{e}_1 + \hat{e}_1 \frac{i(\hat{p}_1 - \hat{k}_2) - m}{(\hat{p}_1 - \hat{k}_2)^2 + m^2} \hat{e}_2 \right] u(p_1).$$

Вероятность комптон-эффекта дается формулой

$$P'_{21} = |M_{21}|^2 (\delta^4(p_1 + k_1 - p_2 - k_2))^2. \qquad (127,2)$$

Для того чтобы исключить квадрат $\delta$-функции, удобно воспользоваться определением четырехмерной $\delta$-функции

$$\delta^4(p) = \frac{1}{(2\pi)^4} \int e^{ipx} d^4x.$$

В точке $p = 0$, которая только и играет существенную роль, как видно из (127,2), четырехмерный интеграл равен $\frac{1}{(2\pi)^4} VT$, где $V$ — нормировочный объем, а $T$ — время процесса. Выбирая $V$ за единицу, для вероятности $P_{21}$ перехода в единицу времени имеем

$$P_{21} = \frac{1}{T} P'_{21} = \frac{1}{(2\pi)^4} |M_{21}|^2 \delta^4(p_1 + k_1 - p_2 - k_2). \qquad (127,3)$$

Конечное состояние системы определяется импульсами электрона $\boldsymbol{p}_2$ и рассеянного фотона $\boldsymbol{k}_2$. Число конечных состояний в интервале импульсов $d\boldsymbol{p}_2$ и $d\boldsymbol{k}_2$ дается обычным соотношением $\frac{d\boldsymbol{p}_2\, d\boldsymbol{k}_2}{(2\pi)^6}$. Вероятность перехода в интервал конечных состояний $d\boldsymbol{p}_2\, d\boldsymbol{k}_2$ напишется в виде

$$dW_{21} = \frac{1}{(2\pi)^4} |M_{21}|^2 \delta^4(p_1 + k_1 - p_2 - k_2) \frac{d\boldsymbol{p}_2\, d\boldsymbol{k}_2}{(2\pi)^6}. \qquad (127,4)$$

Четырехмерная $\delta$-функция выражает закон сохранения энергии и импульса

$$p_1 + k_1 = p_2 + k_2. \qquad (127,5)$$

Из этого соотношения легко определить частоту рассеянного фотона как функцию угла рассеяния $\vartheta$, т. е. угла между векторами $\boldsymbol{k}_1$ и $\boldsymbol{k}_2$,

$$p_1^2 + k_1^2 + 2p_1k_1 = p_2^2 + k_2^2 + 2p_2k_2,$$

но

$$p_1^2 = \boldsymbol{p}_1^2 - E_1^2 = -m^2 = p_2^2, \qquad k_1^2 = \boldsymbol{k}_1^2 - \omega_1^2 = k_2^2 = 0$$

и следовательно, $p_1k_1 = p_2k_2$. Пользуясь (127,5), имеем

$$p_1k_1 = p_1k_2 + k_1k_2.$$

Предположим для простоты, что электрон первоначально покоился: $\boldsymbol{p}_1 = 0$, $E_1 = m$. После простых выкладок [ср. (17,11)

ч. II] находим

$$\omega_2 = \frac{\omega_1}{1 + \frac{\omega_1}{m}(1 - \cos\vartheta)}. \qquad (127{,}6)$$

Интегрируя (127,4) по трем компонентам импульса, получаем

$$dW_{21} = \frac{1}{(2\pi)^{10}} |M_{21}|^2 \delta(m + \omega_1 - E_2 - \omega_2)\, \omega_2^2\, d\omega_2\, d\Omega. \qquad (127{,}7)$$

Проинтегрируем это выражение по частоте $\omega_2$. При этом нужно помнить, что энергия $E_2$ также является функцией $\omega_2$:

$$E_2 = \sqrt{m^2 + \boldsymbol{p}_2^2} = \sqrt{m^2 + (\boldsymbol{k}_1 - \boldsymbol{k}_2)^2} = \sqrt{m^2 + \omega_1^2 + \omega_2^2 - 2\omega_1\omega_2\cos\vartheta}.$$

Введем новую переменную $y = E_2 + \omega_2$:

$$dW_{21} = \frac{1}{(2\pi)^{10}} |M_{21}|^2 \delta(m + \omega_1 - y)\, \omega_2^2 \frac{1}{\frac{\partial y}{\partial \omega_2}}\, dy\, d\Omega. \qquad (127{,}8)$$

Интегрируя по $y$, имеем

$$dW_{21} = \frac{1}{(2\pi)^{10}} |M_{21}|^2 \omega_2^2 \frac{1}{\frac{\partial y}{\partial \omega_2}}\Bigg|_{\omega_2 + E_2 = m + \omega_1} d\Omega, \qquad (127{,}9)$$

но

$$\frac{\partial y}{\partial \omega_2} = \frac{\partial(E_2 + \omega_2)}{\partial \omega_2} = 1 + \frac{1}{E_2}(\omega_2 - \omega_1\cos\vartheta). \qquad (127{,}10)$$

Так как берется значение $\omega_2$, удовлетворяющее закону сохранения энергии, то, подставляя (127,6) в (127,10), для вероятности перехода (127,9) находим

$$dW_{21} = \frac{1}{(2\pi)^{10}} \frac{\omega_2^3 E_2}{m\omega_1} |M_{21}|^2 d\Omega. \qquad (127{,}11)$$

Сечение процесса мы получим, деля вероятность перехода на плотность потока падающих фотонов. При нормировке 1 фотон в объеме $V = 1$ плотность потока численно равна скорости света $c$. В выбранной нами системе единиц $c = 1$ и эффективное сечение получается численно равным $dW_{21}$. Полагаем также [см. (126,11)]

$$M_{21} = ie^2 \frac{(2\pi)^5}{2m\sqrt{\omega_1\omega_2}} (\bar{u}(\boldsymbol{p}_2)\, \hat{Q} u(\boldsymbol{p}_1)),$$

где

$$Q = \left[\hat{e}_2 \frac{i(\hat{p}_1 + \hat{k}_1) - m}{(\hat{p}_1 + \hat{k}_1)^2 + m^2} \hat{e}_1 + \hat{e}_1 \frac{i(\hat{p}_1 - \hat{k}_2) - m}{(\hat{p}_1 - \hat{k}_2)^2 + m^2} \hat{e}_2\right] 2m.$$

Выражение для оператора $Q$ можно несколько упростить, если учесть, что

$$(\hat{p}_1 + \hat{k}_1)^2 + m^2 = p_1^2 + k_1^2 + 2p_1k_1 + m^2 = 2p_1k_1 = -2\omega_1 m.$$

Аналогично для знаменателя второй дроби можно написать:

$$(\hat{p}_1 - \hat{k}_2)^2 + m^2 = p_1^2 + k_2^2 - 2p_1k_2 + m^2 = -2p_1k_2 = 2\omega_2 m.$$

Тогда для $\hat{Q}$ имеем

$$\hat{Q} = \left[\hat{e}_1 \frac{i(\hat{p}_1 - \hat{k}_2) - m}{\omega_2} \hat{e}_2 - \hat{e}_2 \frac{i(\hat{p}_1 + \hat{k}_1) - m}{\omega_1} \hat{e}_1\right]. \qquad (127,12)$$

Соответственно дифференциальное эффективное сечение равно

$$d\sigma = \frac{1}{4} r_0^2 \frac{\omega_2^2 E_2}{m\omega_1^2} \left|\bar{u}(\boldsymbol{p}_2) \hat{Q} u(\boldsymbol{p}_1)\right|^2 d\Omega, \qquad (127,13)$$

где $r_0 = \frac{e^2}{m}$ — классический радиус электрона.

Полученное выражение описывает процесс, в котором электрон и фотон в начальном и конечном состояниях имеют вполне определенную поляризацию. Если электроны в начальном состоянии не поляризованы, а поляризацией конечного состояния мы не интересуемся, то эффективное сечение должно быть усреднено по спиновым состояниям электрона в начальном состоянии и просуммировано по конечным спиновым состояниям. Следовательно мы должны определить величину

$$\overline{d\sigma} = \frac{1}{2} \sum_{\sigma_2} \sum_{\sigma_1} \frac{1}{4} r_0^2 \frac{\omega_2^2 E_2}{m\omega_1^2} \left|\bar{u}_{\sigma_2}(\boldsymbol{p}_2) \hat{Q} u_{\sigma_1}(\boldsymbol{p}_1)\right|^2 d\Omega =$$
$$= \frac{1}{8} r_0^2 \frac{\omega_2^2 E_2}{m\omega_1^2} \sum_{\sigma_1, \sigma_2} \left(u_{\sigma_2}^+ \beta \hat{Q} u_{\sigma_1}\right)\left(u_{\sigma_1}^+ \hat{Q}^+ \beta u_{\sigma_2}\right), \qquad (127,14)$$

где $u_{\sigma_1}$, $u_{\sigma_2}$ — состояния с определенной поляризацией. Например, $(\widehat{s\boldsymbol{p}_2}) u_{\sigma_2} = \sigma_2 |\boldsymbol{p}_2| u_{\sigma_2}$, т. е. $\sigma_2$ — проекция спина на направление движения, $\hat{\sigma}_2 = \pm 1/2$. Оператор $s$ определен в § 117.

Сумму по $\sigma_1$, входящую в (127,14), удобно переписать в виде

$$\sum_{\sigma_1} \left(u_{\sigma_2}^+ \beta \hat{Q} u_{\sigma_1}\right)\left(u_{\sigma_1}^+ \hat{Q}^+ \beta u_{\sigma_2}\right) = \sum_{\sigma_1} \left(\sigma_2 | \beta \hat{Q} | \sigma_1\right)\left(\sigma_1 | \hat{Q}^+ \beta | \sigma_2\right). \qquad (127,15)$$

Суммирование ведется по двум спиновым состояниям $\sigma_1$ с положительной энергией. Если бы суммирование проводилось и по состояниям с отрицательной энергией, т. е. по всем возможным состояниям (при данном импульсе), то выражение (127,15) существенно бы упростилось и представляло бы собой матричный элемент $(\sigma_2 | \beta \hat{Q} \hat{Q}^+ \beta | \sigma_2)$ [в соответствии с правилом перемножения матриц (45,6)].

Для того чтобы распространить суммирование на все четыре промежуточные состояния, в расчетах подобного типа применяется следующий вычислительный прием: вводится вспомогательный оператор $\hat{R}$, получивший название проекционного

оператора

$$\hat{R}=\frac{\hat{H}+|E|}{2|E|}=\frac{\alpha\hat{p}+\beta m+|E|}{2|E|}. \qquad (127,16)$$

Действие этого оператора на функции $u$ и $v$, отвечающие положительным и отрицательным энергиям, определяется равенствами

$$\frac{\hat{H}+|E|}{2|E|}u=u; \quad \frac{\hat{H}+|E|}{2|E|}v=0. \qquad (127,17)$$

Заменяя в формуле (127,15) функцию $u_{\sigma_1}$ на функцию $\frac{\alpha\hat{p}_1+\beta m+|E_1|}{2|E_1|}u_{\sigma_1}$, мы можем формально распространить суммирование и на состояния с отрицательной энергией, так как при наличии проекционного оператора последние, в соответствии с (127,17), не вносят никакого вклада в результат.

Вместо матриц $\alpha_k$, $\beta$ введем матрицы $\gamma_\mu$:

$$\alpha_k=i\gamma_4\gamma_k \qquad (k=1,\ 2,\ 3),$$

$$\beta=\gamma_4.$$

Подставляя матрицы $\gamma_\mu$ в (127,16), получим

$$\hat{R}=-\frac{1}{2E}(i\gamma_\mu p_\mu-m)\gamma_4=-\frac{1}{2E}(i\hat{p}-m)\gamma_4. \qquad (127,18)$$

Сумму (127,15) можно переписать в виде

$$\sum_{\sigma_1,\,E_1}\left(u_{\sigma_2}^+\gamma_4\hat{Q}\hat{R}_1u_{\sigma_1}\right)\left(u_{\sigma_1}^+\hat{Q}^+\gamma_4u_{\sigma_2}\right)=\left(u_{\sigma_2}^+\gamma_4\hat{Q}\hat{R}_1\hat{Q}^+\gamma_4u_{\sigma_2}\right). \qquad (127,19)$$

Вычислим далее сумму по проекциям спина в конечном состоянии электрона $\sigma_2$. Здесь также удобно перейти к суммированию по всем четырем состояниям, введя проекционный оператор $\hat{R}_2$

$$S=\sum_{\sigma_2,\,E_2}\left(u_{\sigma_2}^+\gamma_4\hat{Q}\hat{R}_1\hat{Q}^+\gamma_4\hat{R}_2u_{\sigma_2}\right). \qquad (127,20)$$

Суммирование ведется как по состояниям с положительной, так и по состояниям с отрицательной энергией. Мы видим, что выражение (127,20) представляет собой сумму диагональных матричных элементов, т. е.

$$S=\mathrm{Sp}\left(\gamma_4\hat{Q}\hat{R}_1\hat{Q}^+\gamma_4\hat{R}_2\right)=\mathrm{Sp}\,(\hat{Q}R_1\hat{Q}^+\gamma_4\hat{R}_2\gamma_4), \qquad (127,21)$$

так как под знаком Sp можно производить циклическую перестановку матриц, что легко непосредственно проверить. Подставляя это выражение в (127,14) и учитывая, что $\gamma_4^2=1$, $\hat{\boldsymbol{p}}_1=0$, $E_1=m$, получаем

$$d\sigma=\frac{1}{32}r_0^2\frac{\omega_2^2}{m^2\omega_1^2}\mathrm{Sp}\left[\hat{Q}\,(i\hat{p}_1-m)\gamma_4\hat{Q}^+\gamma_4(i\hat{p}_2-m)\right]. \qquad (127,22)$$

Для любого оператора вида $\hat{A}$, у которого четвертая компонента является мнимой, а три — вещественными, выполняется следующее равенство:

$$\gamma_4 \hat{A}^+ \gamma_4 = -\hat{A}. \qquad (127,23)$$

Для произведения операторов соответственно имеем

$$\gamma_4 \hat{A}^+ \hat{B}^+ C^+ \gamma_4 = \gamma_4 \hat{A}^+ \gamma_4 \gamma_4 \hat{B}^+ \gamma_4 \gamma_4 \hat{C}^+ \gamma_4 = (-\hat{A})(-\hat{B})(-\hat{C}). \qquad (127,24)$$

Тогда выражение $\gamma_4 \hat{Q}^+ \gamma_4$ перепишется в виде

$$\gamma_4 \left\{ \frac{1}{\omega_1} \hat{e}_1^+ \left[ i(\hat{p}_1 + \hat{k}_1)^+ + m \right] \hat{e}_2^+ - \frac{1}{\omega_2} \hat{e}_2^+ \left[ i(\hat{p}_1 - \hat{k}_2)^+ + m \right] \hat{e}_1^+ \right\} \gamma_4 =$$
$$= \left\{ \frac{1}{\omega_1} \hat{e}_1 [-i(\hat{p}_1 + \hat{k}_1) + m] \hat{e}_2 + \frac{1}{\omega_2} \hat{e}_2 [i(\hat{p}_1 - \hat{k}_2) - m] \hat{e}_1 \right\}. \qquad (127,25)$$

Просуммируем теперь эффективное сечение по конечным состояниям фотона и усредним по начальным состояниям. Чтобы вычислить эффективное сечение для случая, когда падающий фотон поляризован по оси *1*, а рассеянный — по оси *2*, в выражение (127,12) для $\hat{Q}$ следует подставить значения $\hat{e}_1 = \gamma_1$ и $\hat{e}_2 = \gamma_2$. Поскольку, однако, падающие фотоны не поляризованы, а поляризацией рассеянных фотонов мы не интересуемся, то следует вместо $\hat{e}_1$ подставить $\gamma_\nu$, а вместо $\hat{e}_2$ подставить $\gamma_\mu$ и просуммировать по всем значениям индексов $\nu$ и $\mu$. Тогда имеем

$$d\sigma = \frac{1}{32} r_0^2 \frac{\omega_2^2}{m^2 \omega_1^2} \operatorname{Sp} \left\{ \left[ \frac{1}{\omega_2} \gamma_\nu (i(\hat{p}_1 - \hat{k}_2) - m) \gamma_\mu - \right.\right.$$
$$- \left. \frac{1}{\omega_1} \gamma_\mu (i(\hat{p}_1 + \hat{k}_1) - m) \gamma_\nu \right] (i\hat{p}_1 - m) \left[ \frac{1}{\omega_2} \gamma_\mu (i(\hat{p}_1 - \hat{k}_2) - m) \gamma_\nu - \right.$$
$$\left.\left. - \frac{1}{\omega_1} \gamma_\nu (i(\hat{p}_1 + \hat{k}_1) - m) \gamma_\mu \right] (i\hat{p}_2 - m) \right\}, \qquad (127,26)$$

причем по дважды повторяющимся индексам $\mu$ и $\nu$ проводится суммирование.

Хотя свободный фотон может быть поляризован по двум направлениям, перпендикулярным к направлению движения, суммирование по $\mu$ и $\nu$ фактически можно проводить по всем четырем значениям. Это связано с тем, что не существует реальных фотонов, поляризованных по направлению движения и по временно́й оси и их формальный учет не изменяет окончательного результата [1]).

---

[1]) См., например, А. И. Ахиезер, В. Б. Берестецкий, Квантовая электродинамика, «Наука», 1969.

Соотношение (127, 26) удобно переписать в виде

$$d\sigma = \frac{1}{32} r_0^2 \frac{\omega_2^2}{m^2\omega_1^2} (\mathrm{Sp}\, F_1 + \mathrm{Sp}\, F_2), \qquad (127,27)$$

где

$$F_1 = \left[\frac{1}{\omega_2} \gamma_\nu (i\hat{q}_2 - m) \gamma_\mu - \frac{1}{\omega_1} \gamma_\mu (i\hat{q}_1 - m) \gamma_\nu\right] (i\hat{p}_1 - m) \times$$
$$\times \left[\gamma_\mu \frac{1}{\omega_2} (i\hat{q}_2 - m) \gamma_\nu\right] (i\hat{p}_2 - m), \qquad (127,28)$$

$$q_1 = p_1 + k_1, \qquad q_2 = p_1 - k_2.$$

Выражение для $F_2$ получается из $F_1$ заменой

$$q_1 \to q_2, \quad q_2 \to q_1; \quad \omega_1 \to -\omega_2; \quad \omega_2 \to -\omega_1.$$

Для дальнейших расчетов удобно пользоваться формулами Фейнмана, которые легко проверяются непосредственным вычислением:

$$\left.\begin{aligned} \gamma_\nu\gamma_\nu &= 4, \\ \gamma_\nu\hat{A}\gamma_\nu &= -2\hat{A}, \\ \gamma_\nu\hat{A}_1\hat{A}_2\gamma_\nu &= 4(A_1A_2), \\ \gamma_\nu\hat{A}_1\hat{A}_2\hat{A}_3\gamma_\nu &= -2\hat{A}_3\hat{A}_2\hat{A}_1. \end{aligned}\right\} \qquad (127,29)$$

Используя эти выражения, легко провести суммирование по $\mu$ и $\nu$ в (127,27).

Так, полагая $F_1 = F_1' + F_1''$, найдем:

$$\mathrm{Sp}\, F_1' = \mathrm{Sp}\left\{\gamma_\nu \frac{1}{\omega_2} (i\hat{q}_2 - m) \gamma_\mu (i\hat{p}_1 - m) \gamma_\mu \frac{1}{\omega_2} (i\hat{q}_2 - m) \gamma_\nu (i\hat{p}_2 - m)\right\} =$$
$$= \mathrm{Sp}\left\{\frac{1}{\omega_2} (i\hat{q}_2 - m) \gamma_\mu (i\hat{p}_1 - m) \gamma_\mu \frac{1}{\omega_2} (i\hat{q}_2 - m) \gamma_\nu (i\hat{p}_2 - m) \gamma_\nu\right\} =$$
$$= \frac{4}{\omega_2^2} \mathrm{Sp}\, \{i\hat{q}_2 - m)(i\hat{p}_1 + 2m)(i\hat{q}_2 - m)(i\hat{p}_2 + 2m)\}, \qquad (127,30)$$

$$\mathrm{Sp}\, F_1'' = -\mathrm{Sp}\left\{\gamma_\mu \frac{1}{\omega_1} (i\hat{q}_1 - m) \gamma_\nu (i\hat{p}_1 - m) \gamma_\mu \frac{1}{\omega_2} (i\hat{q}_2 - m) \gamma_\nu (i\hat{p}_2 - m)\right\} =$$
$$= -\frac{4}{\omega_1\omega_2} \mathrm{Sp}\, \{[2i(q_1q_2)\hat{p}_1 + m\hat{q}_2\hat{p}_1 - im\hat{q}_2(i\hat{q}_1 - m) -$$
$$- im\hat{p}_1(i\hat{q}_1 - m) + m^2(i\hat{q}_1 + 2m)](i\hat{p}_2 - m)\}. \qquad (127,31)$$

При вычислении шпуров нужно пользоваться следующими правилами:

1) шпур от произведения нечетного числа векторов $\hat{A}$ равен нулю;

2) шпур от скалярной величины равен ее учетверенному значению;

3) $\operatorname{Sp}\hat{A}_1\hat{A}_2 = 4(A_1A_2)$;

4) $\operatorname{Sp}\hat{A}_1\hat{A}_2\hat{A}_3\hat{A}_4 = 4\{(A_1A_2)(A_3A_4) + (A_1A_4)(A_2A_3) - (A_1A_3)(A_2A_4)\}$. (127,32)

Первые два правила тривиальны. Правило 3) и 4) легко доказать, используя тождество

$$\hat{A}_1\hat{A}_2 + \hat{A}_2\hat{A}_1 = 2(A_1A_2). \qquad (127,33)$$

Если от левой и правой частей взять шпур и провести под знаком шпура циклическую перестановку векторов $\hat{A}_1$ и $\hat{A}_2$, то сразу получим правило 3). Найдем шпур $\hat{A}_1\hat{A}_2\hat{A}_3\hat{A}_4$. Пользуясь приведенным тождеством (127,33), имеем

$$\begin{aligned}\operatorname{Sp}\hat{A}_1\hat{A}_2\hat{A}_3\hat{A}_4 &= -\operatorname{Sp}\hat{A}_1\hat{A}_2\hat{A}_4\hat{A}_3 + 2\operatorname{Sp}\hat{A}_1\hat{A}_2(A_3A_4) = \\ &= \operatorname{Sp}\hat{A}_1\hat{A}_4\hat{A}_2\hat{A}_3 - 2\operatorname{Sp}(A_2A_4)\hat{A}_1\hat{A}_3 + 8(A_1A_2)(A_3A_4) = \\ &= -\operatorname{Sp}\hat{A}_4\hat{A}_1\hat{A}_2\hat{A}_3 + 2\operatorname{Sp}\hat{A}_2\hat{A}_3(A_1A_4) - 8(A_2A_4)(A_1A_3) + 8(A_1A_2)(A_3A_4) = \\ &= -\operatorname{Sp}\hat{A}_1\hat{A}_2\hat{A}_3\hat{A}_4 + 8(A_2A_3)(A_1A_4) - 8(A_2A_4)(A_1A_3) + 8(A_1A_2)(A_3A_4).\end{aligned}$$

Из этого равенства получаем правило 4).

С помощью сформулированных правил находим:

$$\begin{aligned}\operatorname{Sp}F_1' &= \frac{16}{\omega_2^2}\{2(q_2p_1)(q_2p_2) - (q_2^2 + m^2)(p_1p_2) + 4m^2(q_2p_1) - \\ &\qquad - 4m^2q_2^2 + 4m^2(q_2p_2) + 4m^4\}, \\ \operatorname{Sp}F_1'' &= \frac{16}{\omega_1\omega_2}\{2(q_1q_2)(p_1p_2) + m^2(q_2p_1) + m^2(q_2q_1) + m^2(q_2p_2) + \\ &\qquad + m^2(q_1p_1) + m^2(p_1p_2) + m^2(q_1p_2) + 2m^4\}. \qquad (127,34)\end{aligned}$$

Производя указанную выше замену, получаем из этих выражений $\operatorname{Sp}F_2$.

Выполняя необходимые преобразования, после нескольких длинных, но простых вычислений приходим к известной формуле Клейна — Нишины:

$$d\sigma = \frac{1}{2}r_0^2\left(\frac{\omega_2}{\omega_1}\right)^2\left(\frac{\omega_1}{\omega_2} + \frac{\omega_2}{\omega_1} - \sin^2\vartheta\right)d\Omega, \qquad (127,35)$$

которая играет важную роль в приложениях.

При малых энергиях фотона $\omega_1 \ll m$, $\omega_2 = \omega_1$ [см. (127,6)] и формула (127,35) в пределе сводится к классической формуле Томсона

$$d\sigma = \frac{1}{2}r_0^2(1 + \cos^2\vartheta)\,d\Omega,$$

полученной в § 36, ч. I.

## § 128. Смещение термов атома водорода под влиянием поля вакуума (лэмбовское смещение)

Важность расчетной методики Фейнмана не сводится, разумеется, к упрощению и стандартизации вычислений.

Как мы указывали уже в § 124, формализм Фейнмана позволил в наглядной форме получить решение ряда важных задач квантовой электродинамики. К ним относится, в частности, упомянутое выше лэмбовское смещение атомных термов.

Явление лэмбовского смещения дает весьма наглядную иллюстрацию правильности тех представлений, которые были положены в основу квантовой теории излучения и теории позитрона. В квантовой теории излучения принималось, что в пустом пространстве, вакууме, имеется электромагнитное поле. Это то поле, которое отвечает нулевым колебаниям осцилляторов поля. Часто говорят, что совокупность осцилляторов электромагнитного поля, находящихся в состояниях с нулевой энергией, представляет «электромагнитный вакуум». В электромагнитном вакууме, отвечающем состоянию поля с наименьшей энергией, имеется некоторая, отличная от нуля напряженность поля. Точнее говоря, средние (по времени) значения квадратов напряженности полей $(\mathscr{E})^2$ и $(\mathscr{H})^2$ отличны от нуля.

Существование поля вакуума не сказывалось на явлениях излучения, поглощения и рассеяния, которые были рассмотрены в гл. XIII. Все эти явления были связаны с переходами осцилляторов поля из невозбужденных (нулевых) состояний в возбужденные и обратно. Поэтому в течение ряда лет свойства электромагнитного вакуума не были связаны с непосредственно наблюдавшимися явлениями.

В теории позитронов предполагается, что наряду с электромагнитным вакуумом существует электронно-позитронный вакуум, или фон заполненных состояний с отрицательными энергиями, о котором подробно было сказано в § 116. Оказывается, что существование электромагнитного и электронно-позитронного вакуума непосредственно проявляется не только в процессах, происходящих при больших энергиях (например, в комптон-эффекте или в процессе образования пар), но и в особенностях поведения микрочастиц при малых энергиях, в частности в явлении лэмбовского смещения. Явление лэмбовского смещения может быть исследовано строго с помощью формализма Фейнмана. Оказывается, однако, что этот эффект можно обсудить и без привлечения сравнительно сложного расчетного аппарата, на основе простых и наглядных соображений[1]).

---

[1]) См. статью Т. Велтона, Phys. Rev. 74, 1157 (1948); русский перевод см. в сборнике «Вопросы причинности в квантовой механике», ИЛ, 1955.

Для этого прежде всего обсудим вопрос о том, какое значение может иметь среднеквадратичное значение напряженности поля в произвольной точке вакуума.

Для вычисления среднеквадратичной напряженности поля в вакууме рассмотрим нормировочный объем $V_0$. Нулевое колебание с частотой $\omega$ имеет энергию $\frac{\hbar\omega}{2}$. Можно написать очевидное равенство

$$\frac{\hbar\omega}{2} = \frac{1}{8\pi} \int \overline{\left(\mathscr{E}_{0\omega}^2 + \mathscr{H}_{0\omega}^2\right) dV} = \frac{1}{4\pi} \int \overline{\mathscr{E}_{0\omega}^2 dV} = \frac{\mathscr{E}_{0\omega}^2 V_0}{8\pi}, \quad (128,1)$$

где $\mathscr{E}_{0\omega}$ и $\mathscr{H}_{0\omega}$ — амплитуды напряженностей поля в вакууме, отвечающего нулевым колебаниям с частотой $\omega$; черта означает усреднение по периоду колебания. Равенство (128,1) позволяет найти среднеквадратичную амплитуду нулевых колебаний поля с частотой $\omega$:

$$\mathscr{E}_{0\omega}^2 = \frac{4\pi\hbar\omega}{V_0}. \quad (128,2)$$

Рассмотрим электрон в атоме водорода. На этот электрон действует кулоновское поле ядра и флуктуации нулевого поля вакуума. Поэтому на орбитальное движение электрона будет налагаться хаотическое движение под действием поля вакуума.

Пусть $U(\boldsymbol{r})$ означает потенциальную энергию электрона, находящегося в точке $\boldsymbol{r}$. Предположим теперь, что координату электрона можно написать как $\boldsymbol{r} = \boldsymbol{r}_0 + \boldsymbol{r}'$, где $\boldsymbol{r}_0$ — обычное значение координаты электрона, плавно изменяющееся при его орбитальном движении, и $\boldsymbol{r}'$ — его малое смещение под действием случайной силы — флуктуирующего поля. Тогда изменение средней потенциальной энергии электрона, испытывающего случайные смещения, может быть представлено в виде

$$\langle \Delta U \rangle = \langle U(\boldsymbol{r}_0 + \boldsymbol{r}') - U(\boldsymbol{r}_0) \rangle \simeq \left\langle x_i' \frac{\partial U}{\partial x_i} + \frac{1}{2} (x_i' x_k') \frac{\partial^2 U}{\partial x_i \, \partial x_k} \right\rangle =$$

$$= \frac{1}{2} \nabla^2 U \left\langle (x_i')^2 \right\rangle = \frac{1}{6} (\nabla^2 U) \langle (\boldsymbol{r}')^2 \rangle. \quad (128,3)$$

Здесь скобки $\langle \ \rangle$ означают среднее по всевозможным значениям случайной величины $\boldsymbol{r}'$. При усреднении мы учли, что $\langle x_i' \rangle = 0$, а в силу пространственной изотропии случайных смещений

$$\langle x_i' x_k' \rangle = \frac{1}{3} \langle (\boldsymbol{r}')^2 \rangle.$$

Значение потенциальной энергии в множителе $\nabla^2$ берется, очевидно, при значении $\boldsymbol{r} = \boldsymbol{r}_0$.

Потенциальная энергия электрона в атоме без возмущения со стороны поля вакуума не зависит от состояния последнего и знак в ней опущен.

В кулоновском поле протона для $\nabla^2 U(\boldsymbol{r}_0)$ можно написать

$$\nabla^2 U(\boldsymbol{r}_0) = 4\pi e^2 \delta(\boldsymbol{r}_0),$$

так что

$$\langle U \rangle = U(\boldsymbol{r}_0) + \frac{2\pi e^2}{3} \delta(\boldsymbol{r}_0) \langle \boldsymbol{r}'^2 \rangle. \tag{128,4}$$

Для получения смещения атомного терма мы должны взять среднее значение от (128,4) по состоянию электрона в атоме. Тогда имеем

$$\Delta E_{\text{лэмб}} = \overline{\langle U \rangle - U(\boldsymbol{r}_0)} = \overline{\langle \Delta U \rangle} = \\ = \frac{2\pi}{3} e^2 \int \delta(\boldsymbol{r}_0) |\psi_n(\boldsymbol{r}_0)|^2 \langle \boldsymbol{r}'^2 \rangle \, dV_0, \tag{128,5}$$

где $\psi_n$ — волновая функция электрона в атоме. Пользуясь свойством $\delta$-функции, находим

$$\Delta E_{\text{лэмб}} = \overline{\langle \Delta U \rangle} = \frac{2\pi}{3} e^2 |\psi_n(0)|^2 \langle \boldsymbol{r}'^2 \rangle. \tag{128,6}$$

Вычисление $\langle \boldsymbol{r}'^2 \rangle$ среднего квадратичного смещения электрона под действием нулевых колебаний поля может быть выполнено сравнительно просто, если учитывать лишь относительно низкие частоты колебаний поля.

Будем считать, что смещение электрона под действием поля происходит независимо от орбитального движения. Не учитывая релятивистских эффектов, можно написать уравнения движения в виде

$$m \frac{d^2 \boldsymbol{r}'_\omega}{dt^2} = e\mathscr{E}_{0\omega} \sin(\boldsymbol{kr} - \omega t),$$

откуда

$$\boldsymbol{r}'_\omega = -\frac{e\mathscr{E}_{0\omega}}{m\omega^2} \sin(\boldsymbol{kr} - \omega t)$$

и соответственно

$$\overline{\langle (\boldsymbol{r}'_\omega)^2 \rangle} = \frac{e^2}{2m^2\omega^4} \mathscr{E}_{0\omega}^2 = \frac{2\pi e^2 \hbar}{m^2 \omega^3 V_0}, \tag{128,7}$$

где черта означает усреднение по времени. Здесь $\boldsymbol{r}'_\omega$ означает смещение под действием нулевых колебаний поля с частотой $\omega$.

Так как нулевые колебания с разными частотами являются независимыми, их вклад в полное среднеквадратичное смещение электрона находится простым суммированием. Мы можем, следовательно, написать для полного среднеквадратичного смещения выражение

$$\langle \boldsymbol{r}'^2 \rangle = \int \overline{\langle (\boldsymbol{r}'_\omega)^2 \rangle} \frac{\omega^2 \, d\omega V_0}{\pi^2 c^3} = \frac{2e^2\hbar}{\pi c^3 m^2} \int\limits_{\omega_{\min}}^{\omega_{\max}} \frac{d\omega}{\omega}, \tag{128,7'}$$

где интегрирование ведется по всевозможным частотам нулевых колебаний.

Если бы не существовало электронно-позитронного вакуума, то частоты нулевых колебаний поля могли бы принимать как угодно большие значения и полученная формула не имела бы никакого смысла.

Оказывается, однако, что при частотах больших, чем минимальная частота рождения пар $\omega_1 = \frac{2mc^2}{\hbar}$, возникает взаимодействие между нулевыми колебаниями поля и заполненным фоном отрицательных энергий (электромагнитным и электронно-позитронным вакуумом). Это взаимодействие наглядно можно представить себе как взаимодействие между флуктуациями «тока», связанного со случайным смещением электрона с положительной энергией и флуктуациями «токов», связанных со случайными смещениями электронов фона заполненных состояний, вызванных действием нулевых колебаний электромагнитного вакуума. Поскольку в силу принципа Паули все электроны стремятся находиться в удалении друг от друга (ср. § 67), оказывается, что флуктуации электронов фона находятся в противоположной фазе по отношению к флуктуациям электрона с положительной энергией. В результате происходит их взаимное погашение, и среднеквадратичное смещение электрона оказывается значительно меньшим, чем даваемое формулой (128,7). Упрощая истинное положение вещей, можно сказать, что при частотах больших $\omega_1$ среднеквадратичное смещение электрона обращается в нуль.

Поэтому в качестве верхнего предела интегрирования в (128,7′) по частотам поля следует выбрать величину $\omega_{max} = \omega_1$. При определении минимальной частоты $\omega_{min}$ нужно учесть, что рассматриваемый нами электрон не является свободным, но связан в атоме.

Частота $\omega_{min}$ по порядку величины равна ридберговской частоте электрона в водородном атоме, т. е.

$$\omega_{min} = \omega_0 = 2\pi R = \frac{me^4}{2\hbar^3},$$

где $R$ — постоянная Ридберга, равная $\frac{|E_0|}{2\pi\hbar}$, $E_0$ — энергия основного состояния атома. Пользуясь этими выражениями для $\omega_{min}$ и $\omega_{max}$, находим

$$\langle r'^2 \rangle = \frac{2e^2\hbar}{\pi c^3 m^2} \ln \frac{2mc^2}{\hbar\omega_0} = \frac{2}{\pi} \frac{e^2}{\hbar c} \left( \frac{\hbar}{mc} \right)^2 \ln \frac{2mc^2}{\hbar\omega_0} \qquad (128,8)$$

и для сдвига терма находим

$$\Delta E_{\text{лэмб}} = \frac{4}{3} \frac{e^4}{\hbar c} \left( \frac{\hbar}{mc} \right)^2 |\psi_n(0)|^2 \ln \frac{2mc^2}{\hbar\omega_0}. \qquad (128,9)$$

Формула (128,9) показывает, что сдвиг уровней электрона в атоме водорода, связанный с воздействием на него вакуума, имеет место только в $s$-состоянии. Действительно, только в $s$-состоянии величина $|\psi_n(0)|^2$ отлична от нуля. Это сдвиг всегда положителен — уровень в $s$-состоянии должен лежать выше, чем определенный по формуле (119,2).

Вычисление $\Delta E_{\text{лэмб}}$ имеет абсолютный характер, и его числовое значение (с некоторыми дополнительными поправками, не учтенными в приведенном упрощенном выводе) оказывается равным 1057,19 *Мгц*. Опытное значение этой величины оказалось равным 1057,77 ± 0,1 *Мгц*. Идеальное совпадение рассчитанного и измеренного значения лэмбовского смещения является наглядным подтверждением развитых общих представлений о реальности «вакуума».

Совершенно аналогичные расчеты, на которых мы не останавливаемся, позволили найти упомянутую выше поправку к магнитному моменту электрона (см. цитированную статью Велтона). Особенно важным было решение в квантовой электродинамике ряда принципиальных проблем. Удалось построить количественную теорию, позволяющую с любой степенью точности рассчитывать вероятности всевозможных процессов связанных с взаимодействием электронов между собой и с электромагнитным полем.

Принципиальные трудности теории, связанные с расходящимися выражениями, например часто упоминавшаяся трудность обращения в бесконечность собственной массы (или энергии) электрона, удалось до известной степени устранить. В выражениях для собственной энергии частицы и сходных с ним соотношений удалось выделить конечные наблюдаемые величины, тогда как расходящимися выражениями описываются лишь принципиально не наблюдаемые величины.

Эта процедура, получившая название перенормировки, не может быть здесь проведена, и мы отсылаем читателя к специальной литературе, например неоднократно цитированным монографиям С. Швебера, Г. Бете, Ф. Гофмана или А. И. Ахиезера и В. Б. Берестецкого.

ГЛАВА XV

# ОСНОВЫ ТЕОРИИ ЭЛЕМЕНТАРНЫХ ЧАСТИЦ

## § 129. Элементарные частицы и их свойства

В настоящее время открыто большое число (порядка двухсот) элементарных частиц, которые способны превращаться друг в друга, но не состоят, в обычном смысле этого слова, из более мелких элементов. Все их можно разделить на две большие группы — *стабильные* и *короткоживущие* (резонансы). Первый термин является весьма условным, так как в группу стабильных частиц наряду, например, с электроном, который живет бесконечно долго, входит и $\pi^0$-мезон, время жизни которого порядка $10^{-16}$ *сек.* Стабильность понимается лишь в том смысле, что соответствующие частицы живут гораздо дольше характерного времени $10^{-24}$—$10^{-23}$ *сек*, за которое световой сигнал проходит типичное для «размеров» элементарных частиц расстояние $10^{-13}$ *см.*

Стабильные частицы разбиваются на следующие четыре класса:

1) класс *фотонов*, включающий кванты классических полей; сюда относится сам фотон — квант электромагнитного поля, и иногда гравитон — квант гравитационного поля;

2) класс *лептонов* (легких частиц) содержит электрон, мюон, который раньше неудачно называли $\mu$-мезоном, два нейтрино (электронное и мюонное) и четыре соответствующие античастицы; электронное нейтрино образуется при распаде нейтрона, а мюонное нейтрино — мюона:

$$n \to p + e^- + \tilde{\nu}_e; \qquad \mu^- \to e^- + \tilde{\nu}_e + \nu_\mu$$

(тильда отличает античастицы от соответствующих им частиц);

3) в класс *мезонов* (частиц средней массы) входят 3$\pi$-мезона ($\pi^-$ является античастицей к $\pi^+$, а частицы и античастица для $\pi^0$ тождественны), 4$K$-мезона (две частицы и две античастицы) и 1$\eta$-мезон (являющийся сам себе античастицей);

4) класс *барионов* (тяжелых частиц) содержит два нуклона (протон и нейтрон), 1$\Lambda$-гиперон, 3$\Sigma$-гиперона, 2$\Xi$-гиперона, 1$\Omega$-гиперон и соответствующие им античастицы (см. табл. на стр. 594—595).

Само название «резонанс» возникло в связи с тем, что сведения о короткоживущих частицах первоначально были получены из опытов с рассеянием. Наблюдались характерные резонансные максимумы в полном сечении при определенных значениях энергии рассеивающихся частиц. Так, например, в опытах с рассеянием π-мезонов было обнаружено существование ρ-мезона.

В группу короткоживущих частиц входят только барионные и мезонные резонансы — всего более 150 частиц. Среди них наиболее важными являются мезоны ω(1), φ(1), ρ(3), K*(4), и барионные резонансы $\Delta_{1236}$(4), $\Sigma_{1385}$(3), $\Xi_{1530}$(2) со своими античастицами. Кроме того, интересен *f*-мезон, теоретически предсказанный И. Я. Померанчуком и впоследствии обнаруженный экспериментально.

Совокупность всех мезонов и барионов и их резонансов образует большую группу частиц, которые в настоящее время называются *адронами*. Начинает входить в научный обиход и термин *аденоны*, относящийся к лептонам и фотону.

Перечислим кратко основные свойства элементарных частиц.

1. Каждая частица обладает *массой покоя*, которая измеряется в мэвах. Диапазон значений масс различных частиц весьма широк — от 0 (фотон и нейтрино) до 3000 *мэв* и выше ($\Delta_{3230}$). Первоначальная классификация частиц (разбиение на четыре указанных класса) была основана именно на значениях их масс. Но оказалось, что этот признак, как и масса атомов в периодической системе элементов, является достаточно случайным. Особенно ясно это видно на примере резонансных состояний.

2. Важной характеристикой частицы является значение ее *спина* σ. Фотон имеет спин 1 (с некоторыми оговорками, так как его масса покоя равна нулю). Лептоны обладают спином 1/2, стабильные мезоны — спином 0, барионы (кроме Ω) — спином 1/2, Ω-гиперон — спином 3/2. Среди резонансов имеются частицы со значениями спина от 0 до 19/2. Спин выписанных выше мезонных резонансов (кроме *f*) равен 1, барионных резонансов — 3/2, спин *f*-мезона равен 2. Согласно теореме Паули — Людерса, которая доказана на основе самых общих принципов, не зависящих от конкретной динамики, спин частицы однозначно определяет тип статистики: частицы с полуцелым спином (лептоны, барионы и барионные резонансы) подчиняются статистике Ферми — Дирака, а частицы с целым спином (фотон, мезоны и мезонные резонансы) — статистике Бозе — Эйнштейна. Кроме того, спин частицы определяет трансформационные свойства ее волновой функции по отношению к собственным преобразованиям Лоренца. Частицы со спином 0 описываются (псевдо)

скалярной волновой функцией, со спином 1/2 — спинорной волновой функцией, со спином 1 — (псевдо) векторной волновой функцией и т. д.

3. *Четность P*-частицы определяет трансформационные свойства волновой функции относительно преобразования пространственной инверсии. Все стабильные мезоны имеют отрицательную четность, и обладая спином 0, описываются псевдоскалярной волновой функцией. Мезонные резонансы спина 1 (ω, φ, ρ, K*) также имеют отрицательную четность; так как при пространственной инверсии компоненты вектора меняют знак, то волновая функция этих частиц является векторной. Четность *f*-мезона положительна. Барионам и их резонансам можно приписать только относительную четность. Если по определению принять, что четности протона, нейтрона и Λ-гиперона положительны, то четности всех перечисленных выше барионов и их резонансов будут также положительными, а четности антибарионов — отрицательными.

4. Каждая частица характеризуется величиной *электрического заряда*, который (заряд электрона принимается равным —1) может принимать лишь целочисленные значения. В настоящее время известно множество нейтральных частиц и частиц с зарядом, равным по абсолютной величине единице. Заряд шести частиц (Δ-резонансов) равен +2.

5. Для характеристики элементарных частиц вводятся *лептонное число L* и *барионное число B*. По определению, для лептонов $L = +1$, $B = 0$, для антилептонов $L = -1$, $B = 0$, для барионов $L = 0$, $B = +1$, для антибарионов $L = 0$, $B = -1$, для мезонов и фотона $L = B = 0$. Во всех реакциях с участием элементарных частиц эти квантовые числа сохраняются, что и обусловливает их важность.

6. Все адроны разбиваются на небольшие семейства, члены которого обозначаются одним символом (например, π). Эти семейства называются *изомультиплетами*. Частицы, входящие в их состав, обладают примерно одинаковыми массами, но имеют разные заряды. Каждому изомультиплету приписывается определенное значение *изоспина T*, который определяет число членов мультиплета

$$N = 2T + 1.$$

Таким образом, изоспин нуклона и K-мезона равен 1/2, изоспин Σ-гиперона и π-мезона равен 1, изоспин Δ-резонанса равен 3/2 и т. д.

7. Различные частицы, входящие в состав одного изомультиплета, отличаются друг от друга значениями *проекции $T_3$ изоспина* на воображаемую третью ось фиктивного изопространства. В зависимости от значения изоспина $T$, его проекция $T_3$

может принимать целые или полуцелые значения. Понятие изоспина первоначально было введено лишь для нуклона и пиона. В этом случае $T_3$ следующим образом связано с величиной электрического заряда частицы:

$$Q = T_3 + 1/2\,(B). \qquad (129,1)$$

8. После открытия K-мезонов и гиперонов (так называемых странных частиц) возникла необходимость в модификации предыдущей формулы:

$$Q = T_3 + 1/2\,(B + S) \qquad (129,2)$$

(соотношение Гелл-Манна — Нишиджимы). Новое квантовое число $S$ получило название *странности*. В широком круге явлений, например, в реакциях рождения адронов, странность сохраняется, что сразу же позволило объяснить некоторые непонятные особенности этих процессов (скажем, то, что странные частицы всегда рождаются парами). В последние годы вместо странности физики предпочитают использовать другое квантовое число — *гиперзаряд* $Y$, тесно связанный с $S$:

$$Y = B + S. \qquad (129,3)$$

На некоторых других квантовых числах, которые вводятся для характеристики элементарных частиц (временна́я и зарядовая четности, $G$-четность, мюонный заряд и т. д.), мы останавливаться не будем.

## § 130. Типы взаимодействий элементарных частиц

Элементарные частицы могут участвовать в самых различных взаимодействиях: частица аннигилирует с античастицей, при столкновении быстрых частиц происходит их рассеяние и рождаются новые частицы, многие частицы нестабильны и распадаются и т. д. В настоящее время известно четыре типа взаимодействия элементарных частиц, резко различающихся друг от друга интенсивностью и другими свойствами.

1. *Электромагнитное* взаимодействие — взаимодействие заряженных частиц с фотонами, а через их посредство и друг с другом. За счет виртуальных процессов в электромагнитном взаимодействии могут принимать участие и нейтральные частицы. Примерами реакций, которые вызывают электромагнитное взаимодействие, являются превращения:

$$e^- + e^+ \to 2\gamma; \qquad \gamma + e^- \to \gamma + e^- \text{ (комптон-эффект)}$$
$$\pi^0 \to 2\gamma; \qquad \Sigma^0 \to \Lambda + \gamma \quad \text{и т. д.}$$

Электромагнитное взаимодействие имеет бесконечный радиус действия; для реакций, которые оно вызывает, характерны

времена $10^{-16}$—$10^{-14}$ *сек.* Интенсивность электромагнитного взаимодействия определяется зарядом частицы или безразмерной константой связи, в качестве которой в данном случае выступает постоянная тонкой структуры

$$\alpha = e^2/\hbar c = 1/137.$$

Ее малость позволяет рассматривать электромагнитное взаимодействие как возмущение, чем и объясняются успехи квантовой электродинамики (см. гл. XIV).

2. *Сильное* взаимодействие — взаимодействие адронов, ответственное за их рассеяние, за реакции образования и за распады резонансов. Типичные примеры:

$$\pi + N \to \pi + N; \qquad \pi^- + p \to \Sigma^- + K^+;$$
$$\Delta \to N + \pi; \qquad \rho \to 2\pi.$$

Сильное взаимодействие является короткодействующим — радиус действия порядка $10^{-13}$ *см*; для него характерны времена $10^{-24}$—$10^{-23}$ *сек.* Интенсивность сильного взаимодействия характеризуется определенной величиной $g$, являющейся аналогом электрического заряда. Для взаимодействия $\pi$-мезонов с нуклонами безразмерная константа связи равна

$$g^2/\hbar c \cong 14,$$

так что сильное взаимодействие на три порядка интенсивнее электромагнитного. Поэтому при его анализе теория возмущений непригодна. Законченной теории сильных взаимодействий до сих пор не существует.

3. *Слабое* взаимодействие ответственно за медленные распады элементарных частиц, например,

$$p \to n + e^- + \tilde{\nu}_e; \qquad \mu^- \to e^- + \tilde{\nu}_e + \nu_\mu;$$
$$K^+ \to \pi^+ + \pi^0 (\theta\text{-распад}); \qquad K^+ \to \pi^+ + \pi^- + \pi^+ (\tau\text{-распад}).$$

Оно же в принципе может вызывать и другие реакции (например, рассеяние нейтрино на электроне), но подобные процессы имеют чрезвычайно малые сечения и экспериментально не наблюдались. Слабое взаимодействие еще более короткодействующее, чем сильное (возможно, что радиус его действия имеет порядок $10^{-17}$ *см*); характерные времена равны $10^{-10}$—$10^{-6}$ *сек.* Для характеристики интенсивности слабого взаимодействия нельзя ввести столь же естественную безразмерную комбинацию, как это было в предыдущих случаях. Это связано с тем, что аналог электрического заряда, так называемая фермиевская константа $G$, имеет размерность, отличную от размерности $e$.

В безразмерную константу слабого взаимодействия обязательно должна входить некоторая масса. Если взять массу π-мезона, то

$$G^2(\hbar c)^{-2}(\hbar/\mu c)^{-4} \cong 5 \cdot 10^{-14},$$

т. е. слабое взаимодействие примерно на 11 порядков менее интенсивно, чем электромагнитное. Тем не менее, строго говоря, теорию возмущений в этом случае применять нельзя, так как слабое взаимодействие неперенормируемо.

4. *Гравитационное* взаимодействие характеризуется чрезвычайно малой безразмерной константой связи

$$\varkappa M^2/\hbar c = 2 \cdot 10^{-39}$$

($\varkappa$ — гравитационная постоянная, $M$ — масса нуклона), что позволяет не учитывать его на современном этапе развития теории элементарных частиц.

Перечисленные взаимодействия различаются не только интенсивностью, но и свойственными им законами сохранения, что по-видимому, является даже более существенным. Во всех взаимодействиях сохраняется энергия — импульс, угловой момент, электрический заряд и барионное и лептонное числа. Однако для изоспина $T$, его проекции $T_3$, странности $S$ (или гиперзаряда $Y$) и четности $P$ универсальных законов сохранения не существует.

1. Сильное взаимодействие наиболее симметрично — в обусловленных им реакциях сохраняются все указанные квантовые числа. В частности, закон сохранения изоспина является выражением зарядовой независимости: все члены одного изомультиплета по отношению к сильным взаимодействиям ведут себя одинаковым образом.

2. Включение электромагнитного взаимодействия нарушает эквивалентность частиц, входящих в один изомультиплет, так как они обладают разными зарядами. По-видимому, именно оно ответственно за существование небольшого различия в массах этих частиц. Так как включение электромагнитного взаимодействия выделяет определенное направление в изопространстве, то полный изоспин $T$ уже не будет сохраняться, но его проекция $T_3$ еще сохраняется. Выполняются также законы сохранения странности $S$ и четности $P$.

3. Слабое взаимодействие наименее симметрично. В соответствующих ему реакциях не сохраняется ни одно из четырех указанных квантовых чисел. В частности, больше не справедлив закон сохранения четности. Мало того, слабое взаимодействие, по-видимому, не инвариантно и относительно обращения времени (см. § 122).

## § 131. Группы симметрии в квантовой механике

Мы уже подчеркивали, что сколько-нибудь последовательная и законченная теория сильных взаимодействий до сих пор не разработана. В частности, не сформулированы динамические уравнения, описывающие поведение частиц при сильном взаимодействии. Поэтому особую роль приобретает изучение общих свойств симметрии сильных взаимодействий, что позволяет дать удовлетворительную классификацию адронов и получить ряд количественных соотношений.

В § 129 указывалось, что все адроны распадаются на небольшие семейства, изомультиплеты, которым можно приписать определенные значения изоспина $T$. Члены данного мультиплета различаются проекцией $T_3$ изоспина, определяющей величину электрического заряда, и при «выключенном» электромагнитном взаимодействии имеют строго одинаковые массы. В сильных взаимодействиях квантовые числа $T$ и $T_3$ сохраняются.

С аналогичной ситуацией мы уже неоднократно встречались. Например, при движении нерелятивистской частицы в центральном поле ее возможные состояния также группируются в определенные семейства, которые характеризуются различными значениями углового момента $J$. Волновые функции, принадлежащие одному семейству, различаются проекцией момента $J_3$ и соответствуют одной и той же энергии, т. е. образуют вырожденный энергетический уровень. При движении частицы квантовые числа $J$ и $J_3$ сохраняются.

Для всех подобных случаев характерна инвариантность теории относительно определенного класса преобразований в реальном или в некотором фиктивном пространстве (в нашем квантовомеханическом примере — относительно пространственных вращений). Их совокупность является замкнутой, т. е. последовательное применение допустимых преобразований приводит снова к допустимому преобразованию. Кроме того, имеется единичное преобразование и каждому преобразованию соответствует обратное. Таким образом, преобразования инвариантности (симметрии) образуют *группу*. Ее элементы будут обозначаться через $g$, а последовательное применение двух преобразований $g_1$ и $g_2$ будет записываться в виде произведения $g_2g_1$ (именно в таком порядке). Легко видеть, что все пространственные вращения образуют группу — трехмерную группу вращений, обозначаемую как SO(3). Другим примером группы может служить совокупность преобразований Лоренца.

Понятие инвариантности теории относительно данной группы преобразований включает два аспекта: определенные транс-

формационные свойства волновых функций $\psi$ и определенные трансформационные свойства гамильтониана $\hat{H}$.

Относительно групповых преобразований $g$ все гильбертово пространство волновых функций разбивается на инвариантные подпространства, т. е. существуют семейства волновых функций, которые по определенному закону преобразуются только друг через друга:

$$\psi' = u(g)\psi. \tag{131,1}$$

Требуется, чтобы произведению $g_2 g_1$ элементов группы соответствовало произведение операторов $u(g)$:

$$u(g_2 g_1) = u(g_2)\, u(g_1). \tag{131,2}$$

В этом случае говорят, что совокупность операторов $u(g)$ образует *представление* данной группы. Размерность подпространства (максимальное число линейно независимых волновых функций), в котором действуют эти операторы, называется *размерностью* данного *представления*. Если инвариантное подпространство не содержит инвариантных подпространств меньшей размерности, то говорят о *неприводимом* представлении. В противном случае представление называется *приводимым*. Совокупность волновых функций, преобразующихся по неприводимому представлению группы симметрии, в дальнейшем мы будем называть *мультиплетом*.

Из теории момента количества движения известно, что при пространственных вращениях сферические функции $Y_J^{J_3}(\theta, \varphi)$, соответствующие заданному моменту $J$ и всевозможным его проекциям $J_3$, преобразуются только друг через друга. Им соответствует неприводимое представление размерности $2J+1$ группы SO(3), т. е. все сферические функции, соответствующие моменту $J$, образуют $2J+1$-мерный мультиплет группы вращений.

Рассмотрим требования, которые в инвариантной теории накладываются на трансформационные свойства гамильтониана. Подействуем на уравнение Шредингера

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H}\psi \tag{131,3}$$

оператором $u(g)$ представления, по которому преобразуется волновая функция $\psi$. Предполагая, что $u(g)$ коммутирует с оператором $\partial/\partial t$ (анализ более общего случая нам не потребуется) получим

$$i\hbar \frac{\partial (u\psi)}{\partial t} = u\hat{H}u^{-1}u\psi$$

или

$$i\hbar \frac{\partial \psi'}{\partial t} = u\hat{H}u^{-1}\psi'. \tag{131,4}$$

Инвариантность теории означает тождественность формы уравнения Шредингера для исходной $\psi$ и преобразованной $\psi'$ волновых функций, откуда

$$\hat{H} = u\hat{H}u^{-1}$$

или

$$[H, u(g)] = 0. \qquad (131,5)$$

Таким образом, требование инвариантности теории относительно преобразований из некоторой группы приводит к коммутативности гамильтониана со всеми операторами представлений этой группы.

Ниже будут рассматриваться лишь так называемые *группы Ли*, элементы которых являются однозначными дифференцируемыми функциями конечного числа действительных параметров. Последние выбираются так, чтобы их нулевым значениям соответствовал единичный элемент. Таким образом, для группы *Ли*

$$g = g(\alpha_1, \ldots, \alpha_n); \qquad g(0, \ldots, 0) = I. \qquad (131,6)$$

Число $n$ всех независимых действительных параметров группы Ли называется ее *размерностью*. Если преобразование $g$ бесконечно мало отличается от единичного, т. е. является *инфинитезимальным*, то ему соответствуют бесконечно малые значения параметров $\alpha_k$. В этом случае, учитывая (131,6), можно написать так:

$$g(\alpha_1, \ldots, \alpha_n) \cong I + \sum_{k=1}^{n} \alpha_k \left. \frac{\partial g(\alpha_1, \ldots, \alpha_n)}{\partial \alpha_k} \right|_{\alpha_1 = \ldots = \alpha_n = 0} \equiv I + i \sum_{k=1}^{n} \alpha_k I_k. \qquad (131,7)$$

Величины

$$I_k = -i \left. \frac{\partial g(\alpha_1, \ldots, \alpha_n)}{\partial \alpha_k} \right|_{\alpha_1 = \ldots = \alpha_n = 0} \qquad (131,8)$$

(множитель $-i$ вводится для удобства), называемые *генераторами группы*, представляют собой квадратные матрицы, порядок которых равен размерности пространства, в котором действуют групповые преобразования. Генераторами группы вращений являются 3-рядные матрицы $J_x$, $J_y$, $J_z$, приведенные в (51,17). Чтобы в этом убедиться, достаточно взять матрицы конечных поворотов вокруг соответствующих осей координат и воспользоваться определением (131,8).

Операторы $u(g)$ представления группы Ли зависят, очевидно, от тех же параметров $\alpha_k$. Учитывая, что единичному элементу группы соответствует единичный оператор представления, можно записать

$$u(g) = u(\alpha_1, \ldots, \alpha_n); \qquad u(0, \ldots, 0) = I. \qquad (131,9)$$

Операторы представления размерности $N$, соответствующие инфинитезимальным преобразованиям, имеют вид

$$u(g) \cong I + \sum_{k=1}^{n} \alpha_k \left. \frac{\partial u(\alpha_1, \ldots, \alpha_n)}{\partial \alpha_k} \right|_{\alpha_1 = \ldots = \alpha_n = 0} \equiv I + i \sum_{k=1}^{n} \alpha_k L_k. \quad (131,10)$$

При этом величины

$$L_k = -i \left. \frac{\partial u(\alpha_1, \ldots, \alpha_n)}{\partial \alpha_k} \right|_{\alpha_1 = \ldots = \alpha_n = 0}, \quad (131,11)$$

называемые *генераторами представления*, являются $N$-рядными квадратными матрицами. Для группы вращений таковыми с точностью до множителя $\hbar/2$ являются операторы $\hat{J}_x$, $\hat{J}_y$, $\hat{J}_z$ проекций момента. В частности, генераторы спинорного представления совпадают с матрицами Паули [см. (61,13)]. Можно показать, что операторы $u(g)$ данного представления, соответствующие *конечным* преобразованиям, имеют вид

$$u(g) = \exp\left(i \sum_{k=1}^{n} \alpha_k L_k\right) \quad (131,12)$$

[ср., например, формулы (61,13) и (61,12)].

В § 46 мы видели, что физическое содержание теории не изменяется лишь при унитарных преобразованиях волновых функций, что выделяет из множества всех представлений очень важный класс *унитарных представлений*, для которых

$$u^+ u = u u^+ = I. \quad (131,13)$$

Из (131,13) и (131,10) имеем

$$I = u^+ u \cong \left(I - i \sum_{k=1}^{n} \alpha_k L_k^+\right)\left(I + i \sum_{k=1}^{n} \alpha_k L_k\right) \cong I + i \sum_{k=1}^{n} \alpha_k \left(L_k - L_k^+\right),$$

откуда

$$L_k^+ = L_k, \quad (131,14)$$

т. е. генераторы унитарного представления являются эрмитовыми матрицами. Поэтому для инфинитезимальных преобразований

$$u(g) \cong I + i \sum_{k=1}^{n} \alpha_k L_k; \quad u^+(g) = u^{-1}(g) \cong I - i \sum_{k=1}^{n} \alpha_k L_k. \quad (131,15)$$

Отметим еще, что для групп Ли соотношение (131,5), справедливое в инвариантной теории, эквивалентно, очевидно, условию

$$[\hat{H}, L_k] = 0. \quad (131,16)$$

Важность изучения групп симметрии в квантовой механике обусловлена тем, что при их наличии справедливы следующие результаты.

1. Существуют эрмитовы взаимно коммутирующие комбинации генераторов представления, которые коммутируют и с ними. Они называются *инвариантными операторами*, и их основным свойством является то, что на данном мультиплете эти операторы кратны единичному (лемма Шура). Это означает, что все волновые функции одного мультиплета являются собственными функциями любого инвариантного оператора с одним и тем же собственным значением. Таким образом, возникает естественный набор квантовых чисел, число которых равно числу инвариантных операторов, характеризующих мультиплет в целом. В группе вращений имеется один инвариантный оператор $\hat{J}^2 = \hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 + \hat{J}_z^2$, так что в этом случае каждый мультиплет характеризуется значением момента $J$.

2. Среди генераторов представления может быть несколько взаимно коммутирующих. Их число определяется свойствами группы и называется ее *рангом*. Базисные функции мультиплета можно выбрать так, чтобы они были собственными функциями этих генераторов. Соответствующие собственные значения являются квантовыми числами, классифицирующими волновые функции, принадлежащие данному мультиплету. В группе вращений нет взаимно коммутирующих генераторов, т. е. ее ранг равен 1. Поэтому волновым функциям с данным моментом можно приписать еще лишь одно квантовое число, например, значение проекции $J_3$.

3. Описанные генераторы и инвариантные операторы образуют набор эрмитовых операторов, которые коммутируют друг с другом и с гамильтонианом [см. (131,16)]. Поэтому им соответствуют сохраняющиеся и одновременно измеримые физические величины. Следствием инвариантности теории относительно пространственных вращений является сохранение момента $J$ и его проекции $J_3$.

4. Из сказанного следует, что если волновая функция начального состояния системы принадлежит некоторому мультиплету, то в результате реакции (рассеяния или распада) система перейдет в новое состояние, волновая функция которого будет принадлежать тому же мультиплету. Это устанавливает определенные правила отбора для реакций.

5. Из (131,16) и леммы Шура следует, что собственные значения гамильтониана (значения энергии или массы элементарных частиц) для волновых функций одного мультиплета одинаковы. Это объясняет наличие вырождения и позволяет установить его кратность, которая равна размерности мультиплета. В теории, инвариантной относительно группы вращений, имеет место вырождение по $J_3$, причем его кратность равна $2J + 1$.

## § 132. Изогруппа $SU(2)$ и ее представления

Существование адронных мультиплетов с описанными выше свойствами наводит на мысль, что сильное взаимодействие элементарных частиц инвариантно относительно некоторой группы преобразований. Оказалось, что ею является группа $SU(2)$, которая в дальнейшем будет называться *изогруппой.* С математической точки зрения она тесно связана (почти эквивалентна) с группой вращений $SO(3)$.

Группой $SU(2)$ называется совокупность всех унитарных и унимодулярных (детерминант равен 1) матриц второго порядка:

$$g^+g = gg^+ = I; \qquad \det g = 1. \tag{132,1}$$

Унитарные матрицы второго порядка допускают полезную геометрическую интерпретацию. Возьмем 2-мерное комплексное пространство векторов $x$, которые будем записывать в виде столбцов, и введем эрмитово сопряженные векторы $x^+$:

$$x = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix}; \qquad x^+ = (x_1^*,\ x_2^*) \equiv (x^1,\ x^2). \tag{132,2}$$

Рассмотрим в этом пространстве линейное преобразование

$$x' = gx \quad \text{или} \quad x'_i = g_i^j x_j \tag{132,3}$$

(верхний индекс нумерует столбец, нижний — строку, они пробегают значения 1, 2, причем по дважды повторяющимся индексам подразумевается суммирование). Унитарные матрицы второго порядка соответствуют матрицам преобразований (132,3), которые не изменяют квадратичную форму

$$x^+x = x^i x_i = x_1^* x_1 + x_2^* x_2. \tag{132,4}$$

Согласно § 3 инфинитезимальную матрицу $g$ можно записать как

$$g \cong I + i\varepsilon_\alpha \tau_\alpha. \tag{132,5}$$

Здесь $\tau_\alpha$ — генераторы группы $SU(2)$, а $\varepsilon_\alpha$ — ее параметры, число $n$ которых (размерность группы) подлежит определению. Требование унитарности матриц $g$ приводит к эрмитовости ее генераторов $\tau_\alpha$. Замечая, что с точностью до членов второго порядка малости по $\varepsilon_\alpha$, для инфинитезимальной матрицы (132,5)

$$1 = \det g \cong 1 + i\varepsilon_\alpha \operatorname{Sp} \tau_\alpha,$$

приходим к выводу, что след генераторов $\tau_\alpha$ равен нулю. Таким образом, они являются 2-рядными квадратными матрицами

со свойствами

$$\tau_\alpha^+ = \tau_\alpha; \qquad \mathrm{Sp}\,\tau_\alpha = 0. \tag{132,6}$$

На восемь действительных параметров комплексной 2-рядной матрицы эти ограничения накладывают пять (4 плюс 1) условий. Поэтому существуют три независимые матрицы со свойствами (132,6), что и определяет размерность группы $SU(2)$. В качестве ее генераторов можно взять матрицы Паули, которые эрмитовы и обладают нулевым следом:

$$\tau_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}; \qquad \tau_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}; \qquad \tau_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \tag{132,7}$$

Среди них нет взаимно коммутирующих, так что ранг $SU(2)$ равен 1. Сумма квадратов матриц Паули коммутирует с каждой из них:

$$[\tau^2, \tau_\alpha] = 0, \qquad \text{где} \qquad \tau^2 \equiv \tau_1^2 + \tau_2^2 + \tau_3^2. \tag{132,8}$$

Перейдем теперь к построению представлений группы $SU(2)$.

1. Простейшим является тривиальное представление. Его мультиплеты одномерны, т. е. содержат по одной волновой функции $\varphi$, которая не меняется при преобразовании (132,3):

$$\varphi' = \varphi. \tag{132,9}$$

Размерность этого представления равна 1, а его генераторами служат числа 0. Такое представление называется скалярным, а $\varphi$ — *скаляром.*

2. Рассмотрим 2-мерное пространство векторов $\varphi_i$, которые преобразуются по тому же закону, что и векторы $x$:

$$'\varphi_i = g_i^j \varphi_j \quad \text{или} \quad '\varphi_i \cong \left(I + i\varepsilon_\alpha \tau_\alpha\right)_i^j \varphi_j. \tag{132,10}$$

В результате возникают мультиплеты разномерности 2, члены которых преобразуются по представлению той же размерности. Из (132,10) следует, что его генераторами являются сами матрицы $\tau_\alpha$:

$$(L_\alpha)_i^j = (\tau_\alpha)_i^j. \tag{132,11}$$

Это представление называется спинорным, а величины $\varphi_i$ — *спинором* (ср. с формализмом, изложенным в гл. VIII).

3. Возьмем две величины $\varphi^i$, которые преобразуются так же, как компоненты вектора $x^+$:

$$'\varphi^i = (g^+)_j^i \varphi^j \quad \text{или} \quad '\varphi^i \cong (I - i\varepsilon_\alpha \tau_\alpha)_j^i \varphi^j. \tag{132,12}$$

В результате получим 2-мерное представление, которое называется *сопряженным* к спинорному. Его генераторами служат

матрицы

$$(L_\alpha)_i^j = -(\tau_\alpha)_i^j. \qquad (132{,}13)$$

В действительности это представление эквивалентно спинорному, т. е. из величин $\varphi^i$ можно образовать линейные комбинации, преобразующиеся по закону (132,10). Но его введение весьма удобно с формальной точки зрения.

4. Все остальные представления можно построить из спинорного и сопряженного ему. Рассмотрим совокупность $2(p+q)$ величин $\varphi_{i_1 \dots i_p}^{j_1 \dots j_q}$, которые преобразуются как произведение $p$ спиноров и $q$ сопряженных спиноров, т. е. по закону

$$'\varphi_{i_1 \dots i_p}^{j_1 \dots j_q} = g_{i_1}^{i'_1} \dots g_{i_p}^{i'_p} (g^+)_{j'_1}^{j_1} \dots (g^+)_{j'_q}^{j_q} \varphi_{i'_1 \dots i'_p}^{j'_1 \dots j'_q}. \qquad (132{,}14)$$

Для инфинитезимального преобразования имеем

$$'\varphi_{i_1 \dots i_p}^{j_1 \dots j_q} \cong \left(I + i\varepsilon_{\alpha_1}\tau_{\alpha_1}\right)_{i_1}^{i'_1} \dots \left(I + i\varepsilon_{\alpha_p}\tau_{\alpha_p}\right)_{i_p}^{i'_p} \left(I - i\varepsilon_{\beta_1}\tau_{\beta_1}\right)_{j'_1}^{j_1} \dots$$
$$\dots \left(I - i\varepsilon_{\beta_q}\tau_{\beta_q}\right)_{j'_q}^{j_q} \varphi_{i'_1 \dots i'_q}^{j'_1 \dots j'_q}, \qquad (132{,}15)$$

так что генераторы этого представления имеют вид

$$(L_\alpha)_{i_1 \dots i_p,\, j'_1 \dots j'_q}^{i'_1 \dots i'_p,\, j_1 \dots j_q} = \sum_{s=1}^{p} \delta_{i_1}^{i'_1} \dots \delta_{i_{s-1}}^{i'_{s-1}} (\tau_\alpha)_{i_s}^{i'_s} \delta_{i_{s+1}}^{i'_{s+1}} \dots \delta_{i_p}^{i'_p} \delta_{j'_1}^{j_1} \dots \delta_{j'_q}^{j_q} -$$
$$- \sum_{s=1}^{q} \delta_{i_1}^{i'_1} \dots \delta_{i_p}^{i'_p} \delta_{j'_1}^{j_1} \dots \delta_{j'_{s-1}}^{j_{s-1}} (\tau_\alpha)_{j'_s}^{j_s} \delta_{j'_{s+1}}^{j_{s+1}} \dots \delta_{j'_q}^{j_q}. \qquad (132{,}16)$$

Полученное таким способом представление называется прямым произведением $p$ спинорных и $q$ сопряженных ему представлений. Символически

$$\underbrace{(1,\ 0) \otimes \dots \otimes (1,\ 0) \otimes}_{p\ \text{раз}} \quad \underbrace{(0,\ 1) \otimes \dots \otimes (0,\ 1)}_{q\ \text{раз}}$$

(обозначения очевидны).

Если функция $\varphi_{i_1 \dots i_p}^{j_1 \dots j_q}$ симметрична по какой-то паре нижних (или верхних) индексов, то при преобразовании (132,13) это свойство сохраняется. Кроме того, неизменность квадратичной формы (132,4) приводит к сохранению свертки по любой паре верхнего и нижнего индекса, т. е. величины типа $\varphi_{\dots i \dots}^{\dots i \dots}$. Поэтому набор всех функций $\varphi_{i_1 \dots i_p}^{j_1 \dots j_q}$ распадается на отдельные

мультиплеты, члены которых преобразуются только друг через друга, т. е. построенное представление является приводимым. В данном случае условие неприводимости сводится к тому, что $\varphi_{i_1 \dots i_p}^{j_1 \dots j_q}$ должны быть симметричными отдельно по всем нижним и верхним индексам, причем свертка по любой паре нижнего и верхнего индекса обязана обращаться в нуль. Легко подсчитать число независимых величин $\varphi_{i_1 \dots i_p}^{j_1 \dots j_q}$ такого типа, т. е. определить размерность соответствующего неприводимого представления. Общее число нижних (верхних) индексов, равных 1, может меняться от 0 до $p$ (до $q$), при этом остальные индексы равны 2. При условии симметрии порядок следования индексов безразличен, так что число различных полностью симметричных величин $\varphi_{i_1 \dots i_p}^{j_1 \dots j_q}$ равно $(p+1)(q+1)$. Равенство нулю сверток накладывает на них $pq$ условий, так что всего имеется

$$N = (p+1)(q+1) - pq = p + q + 1$$

независимых компонент. Описанное неприводимое представление будет обозначаться символом $(p, q)$, а его размерность — $N(p, q)$. Имеем

$$N(p, q) = p + q + 1. \tag{132,17}$$

Подчеркнем еще раз, что верхние и нижние индексы эквивалентны, так что неприводимое представление определяется, по существу, полным числом индексов, которое равно $p + q$.

Рассмотрим важный для дальнейшего пример прямого произведения спинорного произведения на сопряженное ему, т. е. представление $(1, 0) \otimes (0, 1)$. Функции, преобразующиеся по этому представлению, образуют квадратную матрицу 2-го порядка. В соответствии с (132,13)

$$'\varphi_i^j = g_i^{i'} (g^+)_{j'}^j \varphi_{i'}^{j'}. \tag{132,18}$$

Для инфинитезимальных преобразований (132,14) дает

$$'\varphi_i^j \cong (I + i\varepsilon_\alpha \tau_\alpha)_i^{i'} (I - i\varepsilon_\beta \tau_\beta)_{j'}^j \varphi_{i'}^{j'} \cong \left\{\delta_i^{i'} \delta_{j'}^j + i\varepsilon_\alpha \left[(\tau_\alpha)_i^{i'} \delta_{j'}^j - (\tau_\alpha)_{j'}^j \delta_i^{i'}\right]\right\} \varphi_{i'}^{j'}, \tag{132,19}$$

так что генераторы этого представления имеют вид

$$(L_\alpha)_{ij'}^{i'j} = (\tau_\alpha)_i^{i'} \delta_{j'}^j - \delta_i^{i'} (\tau_\alpha)_{j'}^j. \tag{132,20}$$

Для его разложения на неприводимые представления достаточно выделить из матрицы $\varphi_i^j$ ненулевой след, т. е. переписать ее

в виде

$$\varphi_i^j \equiv \left(\varphi_i^j - \frac{1}{2}\delta_i^j\varphi_k^k\right) + \frac{1}{2}\delta_i^j\varphi_k^k. \qquad (132,21)$$

Последнее слагаемое инвариантно относительно преобразований из группы $SU(2)$, т. е. является скаляром. След матрицы, стоящей в скобках, равен нулю. Она содержит три независимые компоненты, преобразующиеся по неприводимому представлению размерности 3, которое называется *векторным*. Символически разложение (132,21) записывается в форме

$$(1,\ 0) \otimes (0,\ 1) = (1,\ 1) \oplus (0,\ 0). \qquad (132,22)$$

Из (132,16) и (132,8) следует, что для группы $SU(2)$ инвариантными операторами являются величины $\underline{L}^2$:

$$[\underline{L}^2,\ L_\alpha] = 0, \qquad \text{где } \underline{L}^2 \equiv L_1^2 + L_2^2 + L_3^2. \qquad (132,23)$$

Используя (132,16) и (132,7) можно показать, что любая матрица $\varphi_{i_1 \ldots i_p}^{j_1 \ldots j_q}$ мультиплета $(p, q)$ является собственной функцией оператора $\underline{L}^2$, причем

$$\underline{L}^2\varphi_{i_1 \ldots i_p}^{j_1 \ldots j_q} = (p+q)(p+q+2)\,\varphi_{i_1 \ldots i_p}^{j_1 \ldots j_q}. \qquad (132,24)$$

Собственные значения оператора $\underline{L}^2$ зависят только от типа мультиплета (точнее, лишь от его размерности) и служат его характеристикой.

Для классификации базисных элементов мультиплета, в качестве которых можно выбрать комбинации матриц $\varphi_{i_1 \ldots i_p}^{j_1 \ldots j_q}$ лишь с одним ненулевым элементом, можно использовать собственные значения диагонального оператора $L_3$. Так как ранг группы $SU(2)$ равен 1, этого квантового числа достаточно. Из (132,16) и (132,7) заключаем, что если среди $p$ нижних индексов имеется $p_2$, а среди $q$ верхних индексов $q_2$ индексов, равных 2, то

$$L_3\varphi_{i_1 \ldots i_p}^{j_1 \ldots j_q} = [(p-q) - 2(p_2 - q_2)]\,\varphi_{i_1 \ldots i_p}^{j_1 \ldots j_q}. \qquad (132,25)$$

Соседние собственные значения генератора $L_3$, соответствующие базисным элементам данного мультиплета, отличаются на 2. Из (132,25) видно, что минимальное из них равно $-(p+q)$, а максимальное $+(p+q)$, так что всего имеется $p+q+1$ независимых членов мультиплета, и мы снова приходим к формуле (132,17) для размерности неприводимого представления.

## § 133. Изомультиплеты элементарных частиц

Предположим теперь, что сильное взаимодействие элементарных частиц инвариантно относительно группы $SU(2)$. Это означает прежде всего, что волновые функции адронов преобразуются по некоторым ее неприводимым представлениям, т. е. являются произведениями обычной волновой функции, зависящей от пространственных координат и проекции спина, на изоматрицу

$$\Psi = \psi(x,y,z,s_z)\,\varphi_{i_1 \ldots i_p}^{j_1 \ldots j_q}. \qquad (133,1)$$

При этом отдельному адрону удобно сопоставлять такую волновую функцию, в которой матрица $\varphi_{i_1 \ldots i_p}^{j_1 \ldots j_q}$ является одним из базисных элементов. Таким образом, все адроны оказываются размещенными по изомультиплетам, которые характеризуются собственными значениями инвариантного оператора $L^2$. Внутри изомультиплета отдельные адроны классифицируются собственными значениями генератора $L_3$. Вследствие предполагаемой инвариантности сильного взаимодействия относительно изогруппы во всех обусловленных им реакциях эти два квантовых числа будут сохраняться. Кроме того, должно иметь место квантовомеханическое вырождение, т. е. массы частиц, принадлежащих одному изомультиплету, будут строго одинаковыми. При включении электромагнитного взаимодействия, которое считается неинвариантным относительно изогруппы, это вырождение снимается и изомультиплеты расщепляются на отдельные частицы с несколько различными массами. Аналогом этому является, например, эффект Зеемана (§ 74), при котором наложение внешнего магнитного поля, нарушающего инвариантность относительно группы вращений, снимает имевшееся ранее вырождение уровней по проекции момента $J_z$.

Отметим, что для адронов, входящих в один изомультиплет, все квантовые числа (спин $\sigma$, четность $P$, барионное число $B$ и странность $S$ или гиперзаряд $Y$), отличные от собственных значений $L_3$, должны быть одинаковыми. Это следует из того, что соответствующие им операторы коммутируют с генераторами $L_\alpha$, т. е. являются инвариантными операторами, и из леммы Шура.

Вместо генераторов $L_\alpha$ удобно ввести операторы

$$\hat{T}_\alpha \equiv \frac{1}{2} L_\alpha, \qquad (133,2)$$

которые называются операторами проекций изоспина. Тогда в качестве инвариантного оператора естественно взять оператор

квадрата изоспина

$$\hat{T}^2 \equiv \hat{T}_1^2 + \hat{T}_2^2 + \hat{T}_3^2 = \frac{1}{4} L^2. \qquad (133,3)$$

Формулы (132,24) (132,25) теперь принимают вид такой:

$$\hat{T}^2 \varphi_{i_1 \ldots i_p}^{j_1 \ldots j_q} = \frac{1}{4}(p+q)(p+q+2)\varphi_{i_1 \ldots i_p}^{j_1 \ldots j_q} \equiv T(T+1)\varphi_{i_1 \ldots i_p}^{j_1 \ldots j_q}, \qquad (133,4)$$

$$\hat{T}_3 \varphi_{i_1 \ldots i_p}^{j_1 \ldots j_q} = \left[\frac{p-q}{2} - (p_2 - q_2)\right] \varphi_{i_1 \ldots i_p}^{j_1 \ldots j_q} \equiv T_3 \varphi_{i_1 \ldots i_p}^{j_1 \ldots j_q}. \qquad (133,5)$$

Квантовое число

$$T = \frac{1}{2}(p+q) \qquad (133,6)$$

классифицирует мультиплеты адронов и называется *изоспином*, а величина

$$T_3 = \frac{p-q}{2} - (p_2 - q_2) \qquad (133,7)$$

классифицирует базисные элементы изомультиплета, т. е. отдельные принадлежащие ему адроны. Она может принимать значения от $-T$ до $+T$ и называется третьей *проекцией изоспина*. Формула (132,17) для размерности неприводимого представления, т. е. для числа различных частиц, входящих в изомультиплет, принимает вид

$$N(p\ q) \equiv N(T) = 2T + 1. \qquad (133,8)$$

Для волновых функций, являющихся собственными функциями операторов $\hat{T}^2$ и $\hat{T}_3$ с собственными значениями $T$ и $T_3$, в дальнейшем иногда будут использоваться дираковские обозначения $|T, T_3\rangle$. Наконец, в соответствии с эмпирическим соотношением Гелл-Манна — Нишиджимы (§ 129), положим по определению, что оператором заряда служит

$$\hat{Q} = \hat{T}_3 + \frac{B+S}{2}\hat{I} = \hat{T}_3 + \frac{Y}{2}\hat{I}, \qquad (133,9)$$

где $\hat{I}$ — единичный оператор в пространстве функций $\varphi_{i_1 \ldots i_p}^{j_1 \ldots j_q}$.

Выписанные соотношения указывают на тесную связь группы $SU(2)$ с группой вращений $SO(3)$, при этом изоспин $T$ является полным аналогом момента $J$. Эта связь позволяет использовать весь аппарат теории углового момента, изложенный в § 51—52. В частности, для фактического разложения прямого произведения представлений на неприводимые применим формализм коэффициентов Клебша — Гордана (§ 52).

Рассмотрим теперь конкретные изомультиплеты адронов. Протон и нейтрон обладают примерно одинаковыми массами и тождественны по отношению к сильным взаимодействиям. Они

образуют изодублет, т. е. их волновые функции имеют вид

$$\Psi_p = \psi_p\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}\psi_p\\0\end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix}p\\0\end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix}N_1\\0\end{pmatrix};$$
$$\Psi_n = \psi_n\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}0\\\psi_n\end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix}0\\n\end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix}0\\N_2\end{pmatrix} \qquad (133,10)$$

Волновая функция нуклона записывается как

$$N_i = \begin{pmatrix}p\\n\end{pmatrix}. \qquad (133,11)$$

При условии нормировки

$$\sum_{s_z=\pm\frac{1}{2}} \int dV(|p|^2 + |n|^2) = 1, \qquad (133,12)$$

два слагаемых этого выражения, соответствующие протону и нейтрону, интерпретируются как вероятности обнаружения нуклона в протонном и в нейтронном состояниях. Спинорное представление имеет размерность 2, так что нуклонному изодублету следует приписать изоспин 1/2. Генераторами представления являются матрицы $\tau_\alpha$, так что проекции изоспина $T_3$ являются собственными значениями оператора $1/2(\tau_\alpha)$. Для их нахождения можно воспользоваться формулой (133,7), но в данном случае они легко определяются и непосредственно:

$$\hat{T}_3\begin{pmatrix}p\\0\end{pmatrix} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix}1 & 0\\0 & -1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}p\\0\end{pmatrix} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix}p\\0\end{pmatrix};$$
$$\hat{T}_3\begin{pmatrix}0\\n\end{pmatrix} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix}1 & 0\\0 & -1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0\\n\end{pmatrix} = -\frac{1}{2}\begin{pmatrix}0\\n\end{pmatrix}, \qquad (133,13)$$

так что для протона $T_3 = +1/2$, для нейтрона $T_3 = -1/2$. В соответствии с (133,9), учитывая, что для нуклона $B = 1$, $S = 0$, получим

$$\hat{Q}_N = \hat{T}_3 + \frac{1}{2}\hat{I} = \frac{1}{2}(\tau_3 + I) = \begin{pmatrix}1 & 0\\0 & 0\end{pmatrix}, \qquad (133,14)$$

так что

$$\hat{Q}_N\begin{pmatrix}p\\0\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}1 & 0\\0 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}p\\0\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}p\\0\end{pmatrix}; \quad \hat{Q}_N\begin{pmatrix}0\\n\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}1 & 0\\0 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0\\n\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}0\\0\end{pmatrix}. \qquad (133,15)$$

Таким образом, заряды протона и нейтрона равны соответственно $+1$ и 0, как это и должно быть.

Изодублетами являются также $\Xi$-гиперон, резонанс $\Xi_{1530}$, $K$-мезон и мезонный резонанс $K^*$. Выписанные соотношения

справедливы и для них, с тем лишь отличием, что для $\Xi$-гиперона и его резонанса гиперзаряд $Y = -1\,(B = 1, S = -2)$, так что для этих частиц оператор заряда равен

$$\hat{Q}_{\Xi} = \hat{T}_3 - \frac{1}{2}\hat{I} = \frac{1}{2}(\tau_3 - I) = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \qquad (133,16)$$

Таким образом, имеются следующие изодублеты адронов:

$$N_i = \begin{pmatrix} p \\ n \end{pmatrix}; \quad \Xi_i = \begin{pmatrix} \Xi^0 \\ \Xi^- \end{pmatrix};$$
$$(\Xi_{1530})_i = \begin{pmatrix} \Xi^0_{1530} \\ \Xi^-_{1530} \end{pmatrix}; \quad K_i = \begin{pmatrix} K^+ \\ K^0 \end{pmatrix}; \quad K^*_i = \begin{pmatrix} K^{*+} \\ K^{*0} \end{pmatrix}. \qquad (133,17)$$

Естественно считать, что волновые функции антипротона и антинейтрона преобразуются по представлению, сопряженному к нуклонному, т. е.

$$\Psi_{\tilde{p}} = \psi_{\tilde{p}}(1,\ 0) = (\psi_{\tilde{p}},\ 0) \equiv (\tilde{p},\ 0);$$
$$\Psi_{\tilde{n}} = \psi_{\tilde{n}}(0,\ 1) = (0,\ \psi_{\tilde{n}}) \equiv (0,\ \tilde{n}). \qquad (133,18)$$

Поэтому волновая функция антинуклона записывается в виде

$$\tilde{N}^i = (\tilde{p},\ \tilde{n}). \qquad (133,19)$$

Изоспин антинуклона также равен 1/2, но так как все генераторы теперь изменили знак, $\hat{T}_3 = -1/2(\tau_3)$, и поэтому для антипротона $T_3 = -1/2$, для антинейтрона $T_3 = +1/2$ (следует заметить, что, согласно правилам матричного умножения, на волновую функцию, имеющую вид строки, операторы, являющиеся квадратными матрицами, действуют не слева, а справа). Очевидно, что оператор $Q_{\tilde{N}}$ заряда антинуклона равен $-Q_N$, так что антипротон имеет $Q = -1$, антинейтрон $Q = 0$. Все эти утверждения очевидным образом переносятся и на изодублеты других античастиц.

Существует три $\pi$-мезона $\pi^+$, $\pi^0$ и $\pi^-$ с примерно одинаковыми массами, тождественных по отношению к сильному взаимодействию. Естественно считать, что они образуют изотриплет, т. е. их волновые функции преобразуются по векторному представлению, образуя некоторую матрицу второго порядка с нулевым следом:

$$\pi^j_i = \begin{pmatrix} \pi^1_1 & \pi^2_1 \\ \pi^1_2 & \pi^2_2 \end{pmatrix}. \qquad (133,20)$$

Условие $\pi^i_i = 0$ требует, чтобы

$$\pi^1_1 = -\pi^2_2. \qquad (133,21)$$

Изотриплету соответствует изоспин $T=1$. Воспользовавшись формулой (133,7), получим, что компоненте $\pi_1^1$ и $\pi_2^2$ соответствует $T_3=0$, компоненте $\pi_1^2 - T_3 = +1$ и компоненте $\pi_2^1 - T_3 = -1$. Так как для $\pi$-мезонов $B=S=0$, то

$$\hat{Q}_\pi = T_3, \tag{133,22}$$

т. е. их заряды совпадают со значениями проекций $T_3$. Поэтому

$$\pi_1^1 = -\pi_2^2 \sim \pi^0; \qquad \pi_1^2 \sim \pi^+; \qquad \pi_2^1 \sim \pi^-. \tag{133,23}$$

Потребовав, чтобы изоматрицы, входящие в состав волновой функции каждого $\pi$-мезона, были нормированы на единицу, т. е. образовывали ортонормированный базис изотриплета, и учитывая (133,20) и (133,23), для полной волновой функции $\pi$-мезона окончательно получим

$$\pi_i^l = \begin{pmatrix} \pi^0/\sqrt{2} & \pi^+ \\ \pi^- & -\pi^0/\sqrt{2} \end{pmatrix}. \tag{133,24}$$

Учитывая, что компоненты $\pi_i^l$ преобразуются друг через друга по закону (132,18) и пользуясь свойствами унитарных унимодулярных матриц, нетрудно показать, что волновые функции

$$\pi^+ = \pi_1^2; \qquad \pi^0 = \frac{1}{\sqrt{2}}(\pi_1^1 - \pi_2^2); \qquad \pi^- = \pi_2^1 \tag{133,25}$$

преобразуются как обычные компоненты трехмерного вектора, чем и объясняется название представления (1,1). Поэтому волновую функцию $\pi$-мезона можно записывать и в виде

$$\pi = \begin{pmatrix} \pi^+ \\ \pi^0 \\ \pi^- \end{pmatrix}. \tag{133,26}$$

В таком формализме генераторами векторного представления и операторами проекций изоспина $\hat{T}_3$ будут эрмитовы 3-рядные квадратные матрицы с нулевым следом. Используя (51,17), сразу можно записать:

$$\hat{T}_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}; \qquad \hat{T}_2 = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}; \qquad \hat{T}_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}. \tag{133,27}$$

Непосредственной проверкой убеждаемся, что, действительно,

$$\hat{T}_3=\begin{pmatrix}\pi^+\\0\\0\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\pi^+\\0\\0\end{pmatrix};\quad \hat{T}_3\begin{pmatrix}0\\\pi^0\\0\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0\\0\\0\end{pmatrix};\quad \hat{T}_3\begin{pmatrix}0\\0\\\pi^-\end{pmatrix}=-\begin{pmatrix}0\\0\\\pi^-\end{pmatrix}. \tag{133,28}$$

Полученные результаты автоматически переносятся и на другие изотриплеты адронов: $\Sigma$, $\Sigma_{1385}$, $\rho$. Так как в этих случаях $Y=0$, то оператор заряда также имеет вид (133,22).

Так как представление, сопряженное к (1,1), совпадает с ним самим, а значит, совпадают и их генераторы, то структура изотриплетов античастиц тождественна структуре матрицы (133,24). Например,

$$\tilde{\Sigma}_i^j=\begin{pmatrix}\tilde{\Sigma}^0/\sqrt{2} & \tilde{\Sigma}^-\\ \tilde{\Sigma}^+ & -\tilde{\Sigma}^0/\sqrt{2}\end{pmatrix} \tag{133,29}$$

(заметим, что заряд $\tilde{\Sigma}^-$ положителен, а $\tilde{\Sigma}^+$ отрицателен). Для $\pi$-мезонов не существует квантовых чисел, кроме проекции $T_3$, которые отличали бы частицы от античастиц (для $\Sigma$-гиперона такими квантовыми числами являются барионное число и странность). Поэтому античастицей по отношению к $\pi^+$ является $\pi^-$, и наоборот, а в случае $\pi^0$ частица тождественна с античастицей. Именно этим объясняется, что для $\pi$-мезонов частицы и античастицы входят в один изомультиплет, а скажем, $\Sigma$ и $\tilde{\Sigma}$ образуют два разных изомультиплета. Аналогичная ситуация имеет место и в случае $\rho$-мезонов:

$$\rho_i^j=\begin{pmatrix}\rho^0/\sqrt{2} & \rho^+\\ \rho^- & -\rho^0/\sqrt{2}\end{pmatrix},\quad \text{причем}\quad \tilde{\rho}^+=\rho^-;\quad \tilde{\rho}^-=\rho^+;\quad \tilde{\rho}^0=\rho^0. \tag{133,30}$$

Четыре нуклонных резонанса $\Delta^{++}$, $\Delta^+$, $\Delta^0$ и $\Delta^-$ образуют изоквартет, т. е. их волновые функции преобразуются по неприводимому представлению размерности 4, образуя матрицу $\Delta_{ijk}$, симметричную по любой паре индексов. Изоквартету соответствует изоспин $T=3/2$. Из (133,7) следует, что для компоненты $\Delta_{111}$ проекция изоспина $T_3=3/2$, для компонент $\Delta_{112}=\Delta_{121}=$ $=\Delta_{211}$ — $T_3=1/2$, для компонент $\Delta_{122}=\Delta_{212}=\Delta_{221}$ — $T_3=-1/2$ и для компоненты $\Delta_{222}$ — $T_3=-3/2$. Так как для $\Delta$-резонансов $Y=1$ $(S=0)$, то

$$\hat{Q}_\Delta=\hat{T}_3+\frac{1}{2}\hat{I}, \tag{133,31}$$

так что

$$\begin{gathered}\Delta_{111}\sim\Delta^{++};\quad \Delta_{112}=\Delta_{121}=\Delta_{212}\sim\Delta^+;\\ \Delta_{122}=\Delta_{212}=\Delta_{221}\sim\Delta^0;\quad \Delta_{222}\sim\Delta^-.\end{gathered} \tag{133,32}$$

Из условий нормировки следует, что в первом и последнем соотношениях коэффициент пропорциональности равен 1, а во втором и третьем случаях он равен $1/\sqrt{3}$. Изоквартет $\tilde{\Delta}$ заполняется очевидным образом.

Существуют адроны, например, $\Lambda$- и $\Omega$-гипероны и $\eta$-, $\omega$- и $\varphi$-мезоны, которые являются изосинглетами, т. е. их волновые функции преобразуются по изоскалярному представлению. Так как его генераторы равны нулю, то для изосинглета $T = T_3 = 0$ и $Q = 1/2(Y)$. Античастицы $\tilde{\eta}$, $\tilde{\omega}$, $\tilde{\varphi}$ совпадают с соответствующими им частицами.

## § 134. Волновые функции системы нуклонов и $\pi$-мезонов

Рассмотрим теперь три простейшие составные системы: $N - \tilde{N}$, $N - N$ и $\pi - N$, которые представляют значительный интерес.

1. Разложим волновую функцию системы нуклон — антинуклон

$$\varphi_i^j = \tilde{N}^j N_i \tag{134,1}$$

на неприводимые части (§ 132):

$$\varphi_i^j = \left(\tilde{N}^j N_i - \frac{1}{2}\delta_i^j \tilde{N}^k N_k\right) + \frac{1}{2}\delta_i^j \tilde{N}^k N_k \equiv \chi_i^j + \delta_i^j \chi. \tag{134,2}$$

Последнее слагаемое является изоскалярным, а выражение, стоящее в скобках — изовектором. Вспоминая анализ матрицы (133,20) получим

$$\begin{aligned} &|1, +1\rangle = a\chi_1^2 = a\tilde{n}p; \qquad |1, 0\rangle = b\chi_1^1 = b\frac{1}{2}(\tilde{p}p - \tilde{n}n);\\ &|1, -1\rangle = c\chi_2^1 = c\tilde{p}n; \qquad |0, 0\rangle = d\chi = d\frac{1}{2}(\tilde{p}p + \tilde{n}n), \end{aligned} \tag{134,3}$$

где $a$, $b$, $c$, $d$ — нормировочные коэффициенты. Считая, что пространственно-спиновые части всех волновых функций $\tilde{N}^j$ и $N_i$ нормированы на единицу, из условия ортонормированности базисных состояний (134,3) будем иметь

$$a^2 = c^2 = 1; \qquad b^2 = d^2 = 2.$$

Таким образом, окончательно

$$\begin{gathered} |1, +1\rangle = \tilde{n}p; \quad |1, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(\tilde{p}p - \tilde{n}n); \quad |1, -1\rangle = \tilde{p}n;\\ |0, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(\tilde{p}p + \tilde{n}n). \end{gathered} \tag{134,4}$$

Если система $N - \tilde{N}$ находится в ${}^1S_0$ — состоянии (спины антипараллельны), то ее полный спин равен 0, а четность отрица-

тельна (относительные четности частицы и античастицы противоположны). Таким образом, из нуклона и антинуклона можно построить псевдоскалярные изотриплет и изосинглет, т. е. π-мезон и η-мезон. Этот результат лежит в основе составной модели π-мезона, предложенной в 1949 г. Ферми и Янгом. Изотриплетное состояние $^3S_1$ пары $N - \bar{N}$ можно сопоставить ρ-мезону.

2. Рассматривая волновую функцию системы двух нуклонов

$$\varphi_{ij} = N'_i N''_j, \tag{134,5}$$

выделим из нее симметричную и антисимметричную по индексам части:

$$\varphi_{ij} = N'_i N''_j = \frac{1}{2}(N'_i N''_j + N'_j N''_i) + \frac{1}{2}(N'_i N''_j - N'_j N''_i) \equiv \chi_{[ij]} + \chi_{\{ij\}}. \tag{134,6}$$

Второе слагаемое содержит одну отличную от нуля независимую компоненту ($i = 1$, $j = 2$), т. е. является изоскаляром; первое слагаемое — изовектор. Используя формулу (133,7), получим

$$\begin{aligned} &|1, +1\rangle = a\chi_{11} = ap'p''; \quad |1, 0\rangle = b\chi_{[12]} = b\frac{1}{2}(p'n'' + n'p''); \\ &|1, -1\rangle = c\chi_{22} = cn'n''; \quad |0, 0\rangle = d\chi_{\{12\}} = d\frac{1}{2}(p'n'' - n'p''). \end{aligned} \tag{134,7}$$

Нормировочные коэффициенты определяются как и раньше. Имеем

$$\begin{aligned} &|1, +1\rangle = p'p''; \qquad |1, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(p'n'' + n'p''); \\ &|1, -1\rangle = n'n''; \qquad |0, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(p'n'' - n'p'') \end{aligned} \tag{134,8}$$

[ср. с соотношениями (66,4) — (66,5)]. Первые три функции, соответствующие изоспину 1, симметричны, а последняя функция, отвечающая изоскалярному состоянию системы $p - n$, антисимметрична в изопеременных.

В данном формализме протон и нейтрон рассматриваются как два состояния одной частицы — нуклона. Поэтому полная волновая функция системы двух нуклонов, рассматриваемых в качестве тождественных частиц, должна обладать определенными свойствами симметрии относительно их перестановки. Так как тип симметрии не зависит от того, какая именно пара частиц переставляется, поменяем местами два протона. Они подчиняются статистике Ферми — Дирака, т. е. при перестановке их координат и спинов волновая функция изменяет знак. С другой стороны, из (134,8) видно, что при перестановке изопеременных двух протонов волновая функция не изменяется. Таким образом, нуклоны подчиняются обобщенному принципу

Паули, согласно которому полная волновая функция системы нуклонов антисимметрична относительно перестановки любой их пары. Отсюда следует, в частности, что волновая функция системы $N-N$ с $T=1$ описывает состояние, угловой момент которого отличается от момента изоскалярного ($T=0$) состояния.

3. Из волновой функции системы $\pi$-мезона и нуклона

$$\varphi^k_{ij} = N_i\pi^k_j \tag{134,9}$$

выделим симметричную и антисимметричную по нижним индексам части:

$$\varphi^k_{ij} = \frac{1}{2}\left(N_i\pi^k_j + N_j\pi^k_i\right) + \frac{1}{2}\left(N_i\pi^k_j - N_j\pi^k_i\right) \equiv \varphi^k_{[ij]} + \varphi^k_{\{ij\}}. \tag{134,10}$$

Второе слагаемое содержит две отличные от нуля независимые компоненты $\varphi^k_{\{12\}}$, т. е. является изоспинором ($T=1/2$). Первая же матрица все еще приводима, так как ее свертки не равны нулю. Выделяя их, мы получим

$$\varphi^k_{[ij]} = \frac{1}{2}\left(N_i\pi^k_j + N_j\pi^k_i - \frac{1}{3}\delta^k_i N_m\pi^m_j - \frac{1}{3}\delta^k_j N_m\pi^m_i\right) + \\ + \frac{1}{6}\left(\delta^k_i N_m\pi^m_j + \delta^k_j N_m\pi^m_i\right) \equiv \chi^k_{ij} + \left(\delta^k_i\chi_j + \delta^k_j\chi_i\right). \tag{134,11}$$

Второе слагаемое представляет изоспинор, причем легко проверить, что его компоненты совпадают с двумя компонентами $\varphi^k_{\{12\}}$. Из (133,6) заключаем, что первое слагаемое отвечает изоспину $T=3/2$, т. е. содержит четыре независимые компоненты. Используя (133,7), будем иметь

$$|3/2, +3/2\rangle \sim \chi^2_{11}; \quad |3/2, 1/2\rangle \sim \chi^1_{11}; \; |3/2, -1/2\rangle \sim \chi^2_{22}; \\ |3/2, -3/2\rangle \sim \chi^1_{22}; \; |1/2, +1/2\rangle \sim \chi_1; \; |1/2, -1/2\rangle \sim \chi_2. \tag{134,12}$$

Расписывая компоненты явно и определяя коэффициенты пропорциональности из условий нормировки, окончательно получим:

$$|3/2, +3/2\rangle = p\pi^+; \; |3/2, +1/2\rangle = \sqrt{\frac{2}{3}}\,p\pi^0 - \sqrt{\frac{1}{3}}\,n\pi^+; \; |3/2, -1/2\rangle = \\ = \sqrt{\frac{1}{3}}\,p\pi^- + \sqrt{\frac{2}{3}}\,n\pi^0; \; |3/2, -3/2\rangle = n\pi^-; \; |1/2, +1/2\rangle = \\ = \sqrt{\frac{1}{3}}\,p\pi^0 + \sqrt{\frac{2}{3}}\,n\pi^+; \; |1/2, -1/2\rangle = \sqrt{\frac{2}{3}}\,p\pi^- - \sqrt{\frac{1}{3}}\,n\pi^0. \tag{134,13}$$

К этому результату можно прийти и с помощью формализма, развитого в §§ 51—52. По правилам сложения моментов

изоспин системы, состоящей из π-мезона ($T=1$) и нуклона ($T=1/2$), может принимать значения 3/2 и 1/2. Для построения волновых функций системы, соответствующих определенным значениям $T$ и $T_3$, можно воспользоваться общей формулой (52,3), которая в наших обозначениях записывается так:

$$|T,\ T_3\rangle = \sum_{t_3=\pm 1/2} C^{T}_{T_3-t_3,\ t_3}\ |1,\ T_3-t_3\rangle\ |1/2,\ t_3\rangle. \qquad (134,14)$$

Взяв коэффициенты Клебша — Гордана из таблицы § 52, будем иметь:

$$|3/2,\ +3/2\rangle = C^{3/2}_{1,\ 1/2}\,|1,\ +1\rangle\,|1/2,\ +1/2\rangle = p\pi^+;$$

$$|3/2,\ +1/2\rangle = C^{3/2}_{1,\ -1/2}\,|1,\ +1\rangle\,|1/2,\ -1/2\rangle + C^{3/2}_{0,\ 1/2}\,|1,\ 0\rangle\,|1/2,\ +1/2\rangle = \sqrt{\frac{2}{3}}\,p\pi^0 - \sqrt{\frac{1}{3}}\,n\pi^+;$$

$$\langle 3/2,\ -1/2\rangle = C^{3/2}_{0,\ -1/2}\,|1,\ 0\rangle\,|1/2,\ -1/2\rangle + C^{3/2}_{-1,\ 1/2}\,|1,\ -1\rangle\,|1/2,\ +1/2\rangle = \sqrt{\frac{1}{3}}\,p\pi^- + \sqrt{\frac{2}{3}}\,n\pi^0;$$

$$|3/2,\ -3/2\rangle = C^{3/2}_{-1,\ -1/2}\,|1,\ -1\rangle\,|1/2,\ -1/2\rangle = n\pi^-;$$

$$|1/2,\ +1/2\rangle = C^{1/2}_{1,\ -1/2}\,|1,\ +1\rangle\,|1/2,\ -1/2\rangle + C^{1/2}_{0,\ 1/2}\,|1,\ 0\rangle\,|1/2,\ +1/2\rangle = \sqrt{\frac{1}{3}}\,p\pi^0 + \sqrt{\frac{2}{3}}\,n\pi^+;$$

$$|1/2,\ -1/2\rangle = C^{1/2}_{0,\ -1/2}\,|1,0\rangle\,|1/2,\ -1/2\rangle + C^{1/2}_{-1,\ 1/2}\,|1,\ -1\rangle\,|1/2,\ +1/2\rangle = \sqrt{\frac{2}{3}}\,p\pi^- - \sqrt{\frac{1}{3}}\,n\pi^0.$$

Таким образом, снова приходим к соотношениям (134,13).

Их можно легко обратить и выразить волновую функцию системы, состоящей из одного π-мезона и одного нуклона, через функции $|T, T_3\rangle$:

$$\begin{aligned}
p\pi^+ &= |3/2,\ +3/2\rangle,\\
p\pi^0 &= \sqrt{\frac{2}{3}}\,|3/2,\ +1/2\rangle + \sqrt{\frac{1}{3}}\,|1/2,\ +1/2\rangle,\\
p\pi^- &= \sqrt{\frac{1}{3}}\,|3/2,-1/2\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}}\,|1/2,\ -1/2\rangle;\\
n\pi^+ &= -\sqrt{\frac{1}{3}}\,|3/2,+\ 1/2\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}}\,|1/2,\ +1/2\rangle,\\
n\pi^0 &= \sqrt{\frac{2}{3}}\,|3/2,\ -1/2\rangle - \sqrt{\frac{1}{3}}\,|1/2,\ -1/2\rangle,\\
n\pi^- &= |3/2,\ -3/2\rangle.
\end{aligned} \qquad (134,15)$$

## § 135. Изотопически инвариантное взаимодействие

В § 67 отмечалось, что ядерные силы, т. е. силы, действующие между двумя нуклонами атомного ядра, обладают свойством зарядовой независимости. Это свойство наиболее просто описывается в рамках формализма изоспина. Гипотеза зарядовой независимости ядерных сил утверждает, что взаимодействие двух протонов, двух нейтронов и протона с нейтроном, находящихся в одинаковых пространственно-спиновых состояниях, является идентичным. Из обобщенного принципа Паули следует, что если два нуклона находятся в изотриплетном состоянии (симметричном относительно переменных изоспина), то их координатная волновая функция антисимметрична. Для протона и нейтрона, находящихся в изосинглетном состоянии, спин-координатная часть волновой функции симметрична. Это означает, что взаимодействие двух нуклонов в состояниях $|1, +1\rangle$, $|1, 0\rangle$ и $|1, -1\rangle$ при прочих равных условиях будет одинаковым, в то время как взаимодействие в состоянии $|0, 0\rangle$ является, вообще говоря, существенно иным.

В качестве примера рассмотрим дейтрон, состоящий из одного протона и одного нейтрона. Координатная волновая функция его основного состояния ($l = 0$) симметрична, спиновая волновая функция также симметрична (полный момент дейтрона равен 1, т. е. он находится в триплетном спиновом состоянии $^3S_1$ [1]); поэтому изоспиновая часть волновой функции должна быть антисимметричной и образовывать изосинглет. Из эксперимента известно, что энергия связи дейтрона равна 2,23 *Мэв*. С другой стороны, если бы дейтрон находился в основном состоянии $^1S_0$, то его изоспиновая волновая функция была бы симметричной, т. е. являлась бы изовектором. В этом случае связанных состояний не существует.

Таким образом, в предположении зарядовой независимости ядерные силы определяются изоспином T, но не его проекцией $T_3$. Следовательно, в феноменологической теории ядерных сил, в которой взаимодействие между нуклонами описывается некоторым потенциалом, гамильтониан может содержать лишь инвариантный оператор $\hat{T}^2$ квадрата полного изоспина системы нуклонов, который можно записать в виде

$$\underline{\hat{T}^2} = (\hat{\boldsymbol{T}}' + \hat{\boldsymbol{T}}'')^2 = \frac{1}{4}(\boldsymbol{\tau}' + \boldsymbol{\tau}'')^2 = \frac{1}{4}\boldsymbol{\tau}'^2 + \frac{1}{4}\boldsymbol{\tau}''^2 + \frac{1}{2}(\boldsymbol{\tau}'\boldsymbol{\tau}''). \quad (135,1)$$

Здесь $\boldsymbol{\tau}' = \{\tau_1', \tau_2', \tau_3'\}$ и $\boldsymbol{\tau}'' = \{\tau_1'', \tau_2'', \tau_3''\}$ — матрицы Паули, действующие на изоспиновые индексы первого и второго нуклонов соответственно. Так как операторы $\boldsymbol{\tau}'^2$ и $\boldsymbol{\tau}''^2$ кратны единич-

[1]) С небольшой примесью состояния $^3D_1$ (см. § 76).

ному, то зависимость гамильтониана взаимодействия от переменных изоспина определяется лишь скалярным произведением $(\boldsymbol{\tau}'\boldsymbol{\tau}'')$:

$$\hat{H}_{\text{int}} = u_1 + u_2(\boldsymbol{\tau}'\boldsymbol{\tau}''). \qquad (135,2)$$

При этом $u_1$ и $u_2$ зависят лишь от координат и обычного спина; они расписаны в § 76.

Легко проверить, что гамильтониан (135,2) коммутирует с операторами проекций изоспина $\hat{T}_\alpha$, а значит, и с оператором $\hat{T}^2$:

$$[\hat{H}_{\text{int}},\ T_\alpha] = [\hat{H}_{\text{int}},\ \underline{T}^2] = 0. \qquad (135,3)$$

Следовательно, если не учитывать кулоновского взаимодействия протонов и небольшого различия в массах протона и нейтрона, то в системе взаимодействующих нуклонов имеет место не только закон сохранения проекции изоспина, выражающий тривиальный факт сохранения заряда, но и закон сохранения полного изоспина, который может служить формулировкой зарядовой независимости.

Обратимся теперь к взаимодействию нуклонов с $\pi$-мезонами; как мы знаем из § 67, именно оно ответственно за существование ядерных сил, т. е. за взаимодействие нуклонов, которое выше рассматривалось чисто феноменологически. Последовательное обсуждение соответствующих вопросов возможно лишь в рамках квантовой теории поля, поэтому ограничимся некоторыми замечаниями. Аналогично тому, как это делалось в § 122 при описании слабого взаимодействия, будем рассматривать нуклонные и $\pi$-мезонные функции $N_i$ и $\pi_j^k$ как операторы в пространстве чисел заполнения. Оператор $N_i$ соответствует поглощению нуклона и рождению антинуклона, оператор $(N^+)_i$, наоборот, рождает нуклон и поглощает антинуклон. Оператор $\pi_j^k$ рождает и поглощает $\pi$-мезоны.

Основными процессами, обусловленными рассматриваемым взаимодействием, являются процессы виртуального рождения и поглощения нуклонами $\pi$-мезонов (см. § 67). Поэтому плотность гамильтониана взаимодействия должна иметь следующую общую структуру:

$$N^+N\pi.$$

Так как $\pi$-мезонный оператор является псевдоскаляром, то релятивистская инвариантность и сохранение четности требуют, чтобы он умножался на псевдоскалярную комбинацию $N^+$ и $N$. Вспоминая результаты § 121, приходим к выражению

$$\overline{N}\gamma_5 N\pi.$$

Вследствие зарядовой независимости $\pi - N$-взаимодействия плотность гамильтониана должна быть изоскаляром. Из матриц $\overline{N}^i$, $N_j$ и $\pi^l_k$ можно образовать лишь одну комбинацию такого типа:

$$\overline{N}^i N_j \pi^j_i.$$

Таким образом, окончательно

$$\hat{H}_{\text{int}} = \sqrt{2}\, g\overline{N}^i \gamma_5 N_j \pi^j_i, \tag{135,4}$$

где $g$ — константа сильного пион-нуклонного взаимодействия (аналог электрического заряда), а множитель $\sqrt{2}$ введен по причинам исторического порядка (см. ниже).

Используя явный вид нуклонных и $\pi$-мезонных матриц $\overline{N}^i$, $N_j$ и $\pi^l_k$ [см. (133,17), (133,18) и (133,24) и (135,4)], получим

$$\hat{H}_{\text{int}} = g\left[\sqrt{2}\,\bar{p}\gamma_5 n\pi^+ + \sqrt{2}\,\bar{n}\gamma_5 p\pi^- + (\bar{p}\gamma_5 p - \bar{n}\gamma_5 n)\,\pi^0\right]. \tag{135,5}$$

Следовательно, в предположении зарядовой независимости имеет место следующее соотношение между константами $\pi - N$-взаимодействия:

$$g_{pn\pi^+} : g_{pn\pi^-} : g_{pp\pi^0} : g_{nn\pi^0} = 1 : 1 : \frac{1}{\sqrt{2}} : \left(-\frac{1}{\sqrt{2}}\right). \tag{135,6}$$

Учитывая явный вид матриц Паули и переходя к векторной мезонной функции $\boldsymbol{\pi}$ (133,26), легко проверить, что плотность гамильтониана (135,4) можно переписать как

$$\hat{H}_{\text{int}} = g\overline{N}\gamma_5 \boldsymbol{\tau} N \boldsymbol{\pi}, \tag{135,7}$$

где подразумевается, что изовекторы $\boldsymbol{\tau}$ и $\boldsymbol{\pi}$ скалярно перемножаются. В старых работах только эта форма записи и использовалась, чем объясняется появление множителя $\sqrt{2}$ в выражении (135,4). Аналогично описывается взаимодействие других барионов с мезонами; например, для системы $\pi$, $\Sigma$, $\Sigma$ легко получить, что

$$\hat{H}_{\text{int}} = \sqrt{2}\, g' \overline{\Sigma}^j_i \gamma_5 \Sigma^i_k \pi^k_j. \tag{135,8}$$

В заключение еще раз подчеркнем, что электромагнитное взаимодействие нуклонов нарушает инвариантность относительно преобразований из изогруппы $SU(2)$, и сформулированные выше результаты перестают быть справедливыми. Для него плотность гамильтониана можно написать из тех же соображений, которые использовались при получении (135,4). Учитывая, что оператором рождения и уничтожения фотонов является вектор-потенциал $A_\mu$, будем иметь

$$\hat{H}_{\text{int}} = e\overline{N}\gamma_\mu \hat{Q} N A_\mu, \tag{135,9}$$

где $\hat{Q}$ — оператор заряда нуклона, который дается формулой (133,14). Поэтому

$$\hat{H}_{\text{int}} = \frac{1}{2} e\bar{N}\gamma_\mu (I + \tau_3) N A_\mu, \qquad (135,10)$$

т. е. плотность гамильтониана наряду с изоскалярной содержит и изовекторную часть (слагаемое с $\tau_3$). Наличие последней нарушает сохранение полного изоспина $T$, хотя его проекция $T_3$ сохраняется. Но интенсивность электромагнитного взаимодействия гораздо меньше интенсивности сильного взаимодействия, так что электромагнитными поправками часто можно пренебречь, рассматривая их в лучшем случае в качестве малого возмущения.

Некоторые количественные следствия гипотезы зарядовой независимости сильного взаимодействия, эквивалентной сохранению полного спина, приводятся в следующем параграфе.

## § 136. Рассеяние нуклонов и π-мезонов

Применим формализм изоспина к анализу процессов рассеяния нуклонов на нуклонах и π-мезонов на нуклонах. Обобщение на случай любых других адронов не составляет никакого труда.

Пусть рассматривается несколько реакций:

$$a_i + b_i \to c_i + d_i, \qquad (136,1)$$

причем все частицы типа $a$ (а также $b$, $c$ и $d$) принадлежат одному и тому же изомультиплету. Для волновых функций начального и конечного состояний будем использовать дираковские обозначения $|a_i b_i\rangle$ и $|c_i d_i\rangle$. Амплитуда рассеяния $f^{(i)}$ пропорциональна матричному элементу

$$M^{(i)} = \langle c_i d_i \,|\, a_i b_i \rangle, \qquad (136,2)$$

квадрат модуля которого определяет дифференциальное и полное (после интегрирования по углам) сечения процесса.

Предположим сначала, что состояние частиц до рассеяния имеет определенные значения изоспина $T$ и его проекции $T_3$, т. е. его волновой функцией является $|T, T_3\rangle$. Если выделить часть матричного элемента, соответствующую кулоновскому рассеянию, то из зарядовой независимости будет следовать, что в процессе реакции изоспин не меняется:

$$\langle T', T_3 \,|\, T, T_3 \rangle = 0 \quad \text{при} \quad T' \neq T, \qquad (136,3)$$

т. е. волновой функцией конечного состояния является также функция типа $|T, T_3\rangle$. Кроме того, матричный элемент, отвечающий рассеянию за счет сильного взаимодействия, не может

зависеть от значения проекции $T_3$, а определяется изоспином $T$ (и другими квантовыми числами — импульсами, спинами и т. д.); обозначим

$$\langle T,\ T_3 \,|\, T,\ T_3\rangle \equiv M^{(T)}. \tag{136,4}$$

Ценность формализма изоспина применительно к рассматриваемому классу задач заключается в том, что матричный элемент любого реального процесса из их совокупности (136,1) можно выразить через небольшое число (в большинстве случаев через два) матричных элементов $M^{(T)}$, соответствующих рассеянию в определенном изоспиновом состоянии. Для этого волновые функции $|a_ib_i\rangle$ и $|c_id_i\rangle$ достаточно разложить по волновым функциям $|T, T_3\rangle$, подставить эти разложения в (136,2) и воспользоваться формулами (136,3)—(136,4). Таким способом удается установить ряд соотношений между сечениями различных процессов, отвечающих одинаковым начальным и одинаковым конечным пространственно-спиновым состояниям частиц, участвующих в рассеянии.

1. В качестве первого примера рассмотрим рассеяние протонов на протонах и нейтронов на протонах. Прежде всего из (134,8) выразим волновые функции начального и конечного состояний, т. е. систем $p-p$ и $n-p$ через базисные функции изотриплета и изосинглета:

$$\begin{gathered} |p'p''\rangle = |1,\ +1\rangle; \quad |n'p''\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1,\ 0\rangle - |0,\ 0\rangle); \\ |p'n''\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1,\ 0\rangle + |0,\ 0\rangle). \end{gathered} \tag{136,5}$$

Тогда для процесса рассеяния

$$p' + p'' \to p' + p''$$

получим, что

$$M^{(pp)} = \langle p'p'' \,|\, p'p''\rangle = \langle 1,\ +1 \,|\, 1,\ +1\rangle = M^{(1)}. \tag{136,6}$$

При рассеянии нейтронов на протонах возможны два процесса: обычное упругое рассеяние

$$n' + p'' \to n' + p''$$

и рассеяние с перезарядкой

$$n' + p'' \to p' + n''.$$

Для первого из них

$$\begin{aligned} M^{(\text{упр})} &= \langle n'p'' \,|\, n'p''\rangle = \\ &= \frac{1}{2}[(\langle 1,\ 0| - \langle 0,\ 0|)(|1,\ 0\rangle - |0,\ 0\rangle)] = \frac{1}{2}[M^{(1)} + M^{(0)}], \end{aligned} \tag{136,7}$$

а для второго

$$M^{(\text{пер})}=\langle p'n''\,|n'p''\rangle+\frac{1}{2}[(\langle 1,\ 0\,|+\langle 0,\ 0\,|)(|\,1,\ 0\rangle-|\,0,\ 0\rangle)]=$$
$$=\frac{1}{2}\left[M^{(1)}-M^{(0)}\right]. \qquad (136{,}8)$$

Угловые сечения пропорциональны квадратам модулей матричных элементов, откуда

$$\frac{d\sigma^{(pp)}}{d\Omega}\sim|\,M^{(1)}\,|^2;\qquad \frac{d\sigma^{(\text{упр})}}{d\Omega}\sim\frac{1}{4}|\,M^{(1)}+M^{(0)}\,|^2;$$
$$\frac{d\sigma^{(\text{пер})}}{d\Omega}\sim\frac{1}{4}|\,M^{(1)}-M^{(0)}\,|. \qquad (136{,}9)$$

Суммируя два последних выражения, получим полное сечение рассеяния нейтронов на протонах, которое экспериментально определяется общим числом протонов и нейтронов, рассеянных на данный угол. Окончательно,

$$\frac{d\sigma^{(pp)}}{d\Omega}\sim|\,M^{(1)}\,|^2;\qquad \frac{d\sigma^{(np)}}{d\Omega}\sim\frac{1}{2}|\,M^{(1)}\,|^2+\frac{1}{2}|\,M^{(0)}\,|^2. \qquad (136{,}10)$$

Так как угловая зависимость матричных элементов $M^{(1)}$ и $M^{(0)}$ может быть существенно различной, то, несмотря на зарядовую независимость, поведение сечений рассеяния протонов на протонах и нейтронов на протонах как функций угловой переменной может быть неодинаковым. Эксперимент показывает, что это действительно так. В энергетической области 300—500 *Мэв* в системе центра инерции первое сечение почти не зависит от угла рассеяния, в то время как второе имеет минимум при $\theta=\pi/2$, сильно возрастая в направлении назад и в меньшей степени — в направлении вперед.

2. Несколько более интересным является пример реакций рождения π-мезонов с образованием дейтона при столкновении нуклонов:

$$p+p\to d+\pi^+,$$
$$n+p\to d+\pi^0.$$

Так как изоспин дейтона равен нулю (см. начало § 135), то

$$|\,\pi^+d\rangle=|\,1,\ +1\rangle;\qquad |\,\pi^0d\rangle=|\,1,\ 0\rangle. \qquad (136{,}11)$$

Поэтому

$$M^{(pp)}=\langle\pi^+d\,|\,pp\rangle=\langle 1,\ +1\,|\,1,\ +1,\rangle=M^{(1)},$$
$$M^{(np)}=\langle\pi^0d\,|np\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}[\langle 1,\ 0\,|(|\,1,\ 0\rangle-|\,0,\ 0\rangle)]=\frac{1}{\sqrt{2}}M^{(1)}, \qquad (136{,}12)$$

откуда вытекает соотношение между сечениями

$$\frac{d\sigma^{(pp)}}{d\Omega}\Big/\frac{d\sigma^{(np)}}{d\Omega}=2, \qquad (136{,}13)$$

подтвержденное экспериментально.

3. Еще более интересный случай представляет рассеяние заряженных π-мезонов на протонах:

$$\pi^+ + p \to \pi^+ + p,$$
$$\pi^- + p \to \pi^- + p,$$
$$\pi^- + p \to \pi^0 + n.$$

Отмечая матричные элементы и сечения, относящиеся к этим процессам, знаком π-мезона в конечном состоянии и воспользовавшись формулами (134,15), получим:

$$M^{(+)}=\langle\pi^+p\,|\,\pi^+p\rangle=\langle 3/2,\ +3/2\,|\,3/2,\ +3/2\rangle=M^{(3/2)},$$

$$M^{(-)}=\langle\pi^-p\,|\,\pi^-p\rangle=\left[\left(\sqrt{\tfrac{1}{3}}\langle 3/2,\ -1/2\,|+\sqrt{\tfrac{2}{3}}\langle 1/2,\ -1/2\,|\right)\times\right.$$
$$\left.\times\left(\sqrt{\tfrac{1}{3}}\,|\,3/2,\ -1/2\rangle+\sqrt{\tfrac{2}{3}}\,|\,1/2,\ -1/2\rangle\right)\right]=\tfrac{1}{3}M^{(3/2)}+\tfrac{2}{3}M^{(1/2)};$$

$$M^{(0)}=\langle\pi^0n\,|\,\pi^-p\rangle=\left[\left(\sqrt{\tfrac{2}{3}}\langle 3/2,\ -1/2\,|-\sqrt{\tfrac{1}{3}}\langle 1/2,\ -1/2\,|\right)\times\right.$$
$$\left.\times\left(\sqrt{\tfrac{1}{3}}\,|\,3/2,\ -1/2\rangle+\sqrt{\tfrac{2}{3}}\,|\,1/2,\ -1/2\rangle\right)\right]=\frac{\sqrt{2}}{3}M^{(3/2)}-\frac{\sqrt{2}}{3}M^{(1/2)},$$

откуда

$$f^{(+)}=f^{(1/2)};\qquad f^{(-)}=\frac{1}{3}f^{(3/2)}+\frac{2}{3}f^{(1/2)};$$
$$f^{(0)}=\frac{\sqrt{2}}{3}f^{(3/2)}-\frac{\sqrt{2}}{3}f^{(1/2)}. \qquad (136{,}14)$$

Исключая амплитуды $f^{(3/2)}$ и $f^{(1/2)}$, будем иметь соотношение

$$f^{(+)}-f^{(-)}=\sqrt{2}\,f^{(0)}, \qquad (135{,}15)$$

из которого следуют так называемые соотношения треугольника:

$$\left|\sqrt{\sigma^{(+)}}-\sqrt{\sigma^{(-)}}\right|\leqslant\sqrt{2\sigma^{(0)}}\leqslant\sqrt{\sigma^{(+)}}+\sqrt{\sigma^{(-)}}. \qquad (136{,}16)$$

При некоторых дополнительных предположениях относительно свойств амплитуд можно получить более содержательные соотношения между сечениями. Так, в случае $f^{(1/2)}\simeq 0$

$$\sigma^{(+)}:\sigma^{(-)}:\sigma^{(0)}=9:1:2. \qquad (136{,}17)$$

Если предположить, что $f^{(1/2)} \cong f^{(3/2)}$, то

$$\sigma^{(+)} : \sigma^{(-)} : \sigma^{(0)} = 1 : 1 : 0 \qquad (136{,}18)$$

Наконец, когда $f^{(3/2)} \cong 0$, то

$$\sigma^{(+)} : \sigma^{(-)} : \sigma^{(0)} = 0 : 2 : 1. \qquad (136{,}19)$$

Эксперимент показывает, что при энергии налетающего $\pi$-мезона, равной 120 *Мэв*, полные сечения относятся как $93 : 11 : 22 \cong \cong 9 : 1 : 2$, т. е. в этой энергетической области доминирует рассеяние в состоянии с изоспином $T = 3/2$. При энергиях выше 200 *Мэв* начинает давать заметный вклад и амплитуда $f^{(1/2)}$.

Существует и другой, более простой метод получения соотношений между сечениями, который не требует знания коэффициентов Клебша — Гордана и особенно полезен в тех случаях, когда их вычисление по каким-то причинам является затруднительным. Он называется методом инвариантных амплитуд и будет продемонстрирован на примере рассеяния заряженных $\pi$-мезонов на нуклонах.

В предположении зарядовой независимости изоспин $T$ при рассеянии не меняется; это означает, что полная амплитуда рассеяния одного изомультиплета на другом должна быть изоскаляром. В нашем случае она строится из волновых функций $N_i$ и $\pi_i^j$ начального состояния и волновых функций $\overline{N}^i$ и $\bar{\pi}_i^j$ конечного состояния, которые преобразуются по сопряженным представлениям (чертой мы отмечаем функции, описывающие конечное состояние; одновременно она служит символом сопряженного представления). Матрицы этих волновых функций имеют вид

$$N_i = \begin{pmatrix} p \\ n \end{pmatrix}; \qquad \overline{N}^i = (\bar{p},\ \bar{n});$$
$$\pi_i^j = \begin{pmatrix} \pi^0/\sqrt{2} & \pi^+ \\ \pi^- & -\pi^0/\sqrt{2} \end{pmatrix}; \qquad \bar{\pi}_i^j = \begin{pmatrix} \bar{\pi}^0/\sqrt{2} & \bar{\pi}^- \\ \bar{\pi}^+ & -\bar{\pi}^0/\sqrt{2} \end{pmatrix}. \qquad (136{,}20)$$

Из них можно образовать два независимых изоскаляра

$$\overline{N}^i N_i \bar{\pi}_j^k \pi_k^j \quad \text{и} \quad \overline{N}^i \bar{\pi}_i^j \pi_j^k N_k,$$

так что амплитуда записывается в виде линейной комбинации

$$f = f_1 (\overline{N}^i N_i \bar{\pi}_j^k \pi_k^j) + f_2 (\overline{N}^i \bar{\pi}_i^j \pi_j^k N_k). \qquad (136{,}21)$$

Из (136,20) для изоспиновой части волновых функций частиц начального и конечного состояния имеем:

для протона: $p \to N_1 = 1, \quad \bar{p} \to \overline{N'} = 1,$

для нейтрона: $n \to N_2 = 1, \quad \bar{n} \to \overline{N^2} = 1,$

для $\pi^+$-мезона: $\pi^+ \to \pi_1^2 = 1, \quad \bar{\pi}^+ \to \bar{\pi}'_2 = 1,$

для $\pi^-$-мезона: $\pi^- \to \pi'_2 = 1, \quad \bar{\pi}^- \to \bar{\pi}_1^2 = 1,$

для $\pi^0$-мезона: $\pi^0 \to \pi'_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}, \quad \pi_2^2 = -\frac{1}{\sqrt{2}}; \quad \bar{\pi}^0 \to \bar{\pi}'_1 = \frac{1}{\sqrt{2}},$

$$\bar{\pi}_2^2 = -\frac{1}{\sqrt{2}}$$

(все остальные компоненты равны нулю).

Подставляя эти волновые функции в амплитуду (136,21), получим

$$f^{(+)} = f_1; \qquad f^{(-)} = f_1 + f_2; \qquad f^{(0)} = -\frac{1}{\sqrt{2}} f_2, \tag{136,22}$$

где $f_1$ и $f_2$ — неизвестные, но одинаковые для всех пион-нуклонных процессов функции пространственно-спиновых переменных. Из (136,22) следует, в частности, соотношение (136,15), а значит, и неравенство треугольника. Из эксперимента известно, что в области высоких энергий и малых углов сечение процесса перезарядки $\pi^- + p \to \pi^0 + n$ мало́ по сравнению с упругими сечениями. Полагая поэтому $f_2 \cong 0$, получим приблизительно равенство дифференциальных сечений в направлении вперед для упругого рассеяния $\pi^+$- и $\pi^-$-мезонов на протонах:

$$\left.\frac{d\sigma^{(+)}}{d\Omega}\right|_{\theta \to 0} \cong \left.\frac{d\sigma^{(-)}}{d\Omega}\right|_{\theta \to 0}. \tag{136,23}$$

Амплитуды $f_i$ можно выразить через амплитуды $f^{(T)}$ и наоборот; для этого достаточно сравнить соотношения (136,22) и (136,14), откуда

$$f_1 = f^{(3/2)}; \qquad f_2 = -\frac{2}{3} f^{(3/2)} + \frac{2}{3} f^{(1/2)}. \tag{136,24}$$

В заключение этого параграфа укажем простой способ определения числа независимых инвариантных амплитуд. По правилу сложения моментов находим возможные значения изоспина $T$ начального и конечного состояний. В силу зарядовой независимости возможны лишь переходы с сохранением изоспина $T$, поэтому число независимых амплитуд определяется числом одинаковых значений изоспина в начальном и конечном состояниях. В нашем примере изоспины и начального и конечного состояний равны 3/2 и 1/2, благодаря чему имеются две амплитуды: $f^{(3/2)}$ и $f^{(1/2)}$ или $f_1$ и $f_2$.

## § 137. Унитарная группа $SU(3)$ и ее представления

В предыдущих параграфах изучены некоторые следствия изоспиновой инвариантности сильного взаимодействия, основанной на группе $SU(2)$ и наиболее приспособленной к описанию свойств симметрии нуклонов и $\pi$-мезонов. Однако с открытием странных частиц рамки этой группы оказались слишком узкими, так как ее ранг равен 1 и она дает лишь одно сохраняющееся аддитивное[1]) квантовое число — проекцию изоспина $T_3$, с помощью которого классифицируются члены данного изомультиплета. В то же время имеется еще по крайней мере одна характеристика такого типа — гиперзаряд $Y$ (или странность), так что естественно попытаться сгруппировать несколько изомультиплетов с разными гиперзарядами в один супермультиплет. Для этого необходима группа ранга 2, взаимно коммутирующие генераторы которой дают два одновременно измеримых сохраняющихся квантовых числа, служащих характеристикой членов супермультиплета, так что их можно отождествить с $T_3$ и $Y$. С другой стороны, из требования, чтобы новая теория содержала результаты старой, следует, что изогруппа должна являться частью (подгруппой) более широкой новой группы симметрии. Сформулированным требованиям наиболее просто и естественно можно удовлетворить, если постулировать приближенную инвариантность сильного взаимодействия относительно группы $SU(3)$, которая в дальнейшем будет именоваться *унитарной* (в узком смысле слова)[2]). Соответствующий математический аппарат весьма близок формализму, изложенному в § 132, на результаты которого мы часто будем ссылаться.

Группой $SU(3)$ называется совокупность всех унитарных и унимодулярных матриц третьего порядка, которые отвечают линейным преобразованиям в 3-мерном комплексном пространстве, сохраняющим квадратичную форму $x^+x = x^i x_i = x_1^* x_1 + x_2^* x_2 + x_3^* x_3$ (индексы $i, j$ и т. д. теперь пробегают значения 1, 2, 3). Генераторами этой группы являются эрмитовы квадратные матрицы $\lambda_\alpha$ третьего порядка с равным нулю следом:

$$\lambda_\alpha^+ = \lambda_\alpha; \qquad \mathrm{Sp}\,\lambda_\alpha = 0. \tag{137,1}$$

---

[1]) Под аддитивным квантовым числом понимается величина, значение которой для некоторой системы равно сумме ее значений для подсистем. В этом смысле полный изоспин $T$ — не аддитивная характеристика.

[2]) Следует отметить, что в 1961—1964 г. ситуация не была вполне ясной, так как не представлялось возможности сделать однозначный выбор между $SU(3)$ и так называемой группой $G_2$; некоторое предпочтение отдавалось даже последней. Окончательно вопрос решился в 1964 г., вместе с открытием $\Omega^-$-гиперона (см. § 138).

На 18 действительных параметров комплексных 2-рядных матриц накладывается девять условий эрмитовости и одно условие равенства нулю следа, так что существует восемь независимых матриц со свойствами (137,1), что и определяет размерность группы $SU(3)$. Среди матриц $\lambda_\alpha$ имеются две взаимно коммутирующие (ранг группы $SU(3)$ равен 2), которые можно одновременно диагонализировать. Выберем представление, в котором диагональны $\lambda_3$ и $\lambda_8$:

$$\lambda_1=\begin{pmatrix}0&1&0\\1&0&0\\0&0&0\end{pmatrix};\quad \lambda_2=\begin{pmatrix}0&-i&0\\i&0&0\\0&0&0\end{pmatrix};\quad \lambda_3=\begin{pmatrix}1&0&0\\0&-1&0\\0&0&0\end{pmatrix};$$

$$\lambda_4=\begin{pmatrix}0&0&1\\0&0&0\\1&0&0\end{pmatrix};\quad \lambda_5=\begin{pmatrix}0&0&-i\\0&0&0\\i&0&0\end{pmatrix};\quad \lambda_6=\begin{pmatrix}0&0&0\\0&0&1\\0&1&0\end{pmatrix};\qquad (137,2)$$

$$\lambda_7=\begin{pmatrix}0&0&0\\0&0&-i\\0&i&0\end{pmatrix};\quad \lambda_8=\frac{1}{\sqrt{3}}\begin{pmatrix}1&0&0\\0&1&0\\0&0&-2\end{pmatrix}.$$

Отсюда следует, что если все параметры $\omega_\alpha$ группы $SU(3)$, кроме первых трех, положить равными нулю, то мы получим изогруппу $SU(2)$.

Представления группы $SU(3)$ строятся совершенно аналогично тому, как это было сделано в § 132. Однако взаимно сопряженные представления теперь уже не будут эквивалентны, так что данное неприводимое представление $(p, q)$ определяется двумя (а не одним $p+q$) числами — $p$ и $q$. Определения и соотношения (132,13)—(132,16) по-прежнему сохраняют силу, если в них $\tau_\alpha$ заменить на $\lambda_\alpha$ и считать, что латинские индексы пробегают значения от 1 до 3, а греческие — от 1 до 8.

Найдем число независимых компонент матрицы $\varphi_{i_1\ldots i_p}^{j_1\ldots j}$ симметричной отдельно по всем нижним и верхним индексам и с равными нулю следами по любой паре верхнего и нижнего индекса, т. е. определим размерность $N(p, q)$ неприводимого представления $(p, q)$. В силу симметрии различны лишь компоненты, отличающиеся одним из чисел $p_1$, $p_2$, $p_3$ (числа единиц, двоек и троек среди нижних индексов). Так как $p_1+p_2+p_3=p$, то при данном $p_1$ число $p_2$ может меняться от 0 до $p-p_1$, что дает $p-p_1+1$ разных компонент. Меняя теперь $p_1$ от 0 до $p$, получим общее число различных компонент при фиксированных

верхних индексах:

$$N(p)=\sum_{p_1=0}^{p}(p-p_1+1)=\frac{1}{2}(p+1)(p+2).$$

Аналогично, число различных компонент при фиксированных нижних индексах равно $N(q)=1/2(q+1)(q+2)$, т. е. всего имеется $N(p)N(q)$ компонент. Но они еще не являются независимыми, так как связаны условиями равенства нулю следов. В силу симметрии достаточно, чтобы в нуль обращался след по одной из пар верхнего и нижнего индексов, который будет матрицей с $p-1$ нижними и $q-1$ верхними индексами, имея тем самым $N(p-1)N(q-1)$ компонент. Таким образом, $N(p,q)=$ $=N(p)N(q)-N(p-1)\times N(q-1)$ и окончательно

$$N(p,q)=\frac{1}{2}(p+1)(q+1)(p+q+2). \qquad (137,3)$$

Перечислим наиболее важные представления группы $SU(3)$:

1. $\varphi-(0,0)\equiv 1$ — унитарный скаляр или синглет ($N=1$);
2. $\varphi_i$ и $\varphi^i-(1,0)\equiv 3$ и $(0,1)\equiv\overline{3}$ — унитарные спиноры или триплеты ($N=3$);
3. $\varphi_{ij}$ и $\varphi^{ij}-(2,0)\equiv 6$ и $(0,2)\equiv\overline{6}$ — секступлеты ($N=6$);
4. $\varphi_i^j-(1,1)\equiv 8$ — унитарный вектор или октуплет ($N=8$);
5. $\varphi_{ijk}$ и $\varphi^{ijk}-(3,0)\equiv 10$ и $(0,3)\equiv\overline{10}$ — декуплеты ($N=10$);
6. $\varphi_{ij}^k$ и $\varphi_i^{jk}-(2,1)\equiv 15$ и $(1,2)\equiv\overline{15}$ — 15-плеты ($N=15$);
7. $\varphi_{ij}^{kl}-(2,2)\equiv 27$ — 27-плет и т. д.

(здесь указаны также очень удобные обозначения, которые сразу говорят о размерности неприводимого представления). Следует обратить внимание, например, на представления (2,0) и (1, 1); соответствующие им волновые функции имеют одинаковое число (а именно 2) индексов, но размерности мультиплетов различны (6 и 8 соответственно). Такая ситуация не может встретиться в группе $SU(2)$ в силу эквивалентности ее взаимно сопряженных представлений.

Выпишем теперь важные для дальнейшего разложения некоторых прямых произведений представлений на неприводимые:

$$(1,0)\otimes(0,1)=(0,0)\oplus(1,1) \quad \text{или} \quad 3\otimes\overline{3}=1\oplus 8, \qquad (137,4а)$$

$$(1,0)\otimes(1,0)\otimes(1,0)=(0,0)\oplus(1,1)\oplus(1,1)\oplus(3,0)$$
$$\text{или } 3\otimes 3\otimes 3=1\oplus 8\oplus 8'\oplus 10, \qquad (137,4б)$$

$$(1,0)\otimes(1,0)\otimes(0,1)=(1,0)\oplus(1,0)\oplus(0,2)\oplus(2,1)$$
$$\text{или } 3\otimes 3\otimes\overline{3}=3\oplus 3\oplus\overline{6}\oplus 15, \qquad (137{,}4\text{в})$$
$$(1,1)\otimes(1,1)=(0,0)\oplus(1,1)\oplus(1,1)\oplus(3,0)\oplus(0,3)\oplus(2,2)$$
$$\text{или } 8\otimes 8=1\oplus 8\oplus 8'\oplus 10\oplus\overline{10}\oplus 27, \qquad (137{,}4\text{г})$$
$$(1,1)\otimes(3,0)=(1,1)\oplus(3,0)\oplus(2,2)\oplus(3,1)$$
$$\text{или } 8\otimes 10=8\oplus 10\oplus 27\oplus 35. \qquad (137{,}4\text{д})$$

Докажем, например, разложения (137,4а) и (137,4г). В первом случае функция $\varphi_i\chi^j$ содержит ненулевой след $\varphi_i\chi^i$, являющийся скаляром [представление (0, 0)]; оставшаяся после его выделения функция $\varphi_i\chi^j-\frac{1}{3}\delta_i^j\varphi_k\chi^k$ преобразуется по неприводимому представлению (1,1). Доказательство формулы (137,4г) несколько сложнее. Прежде всего, если функцию $\varphi_i^j\chi_k^l$ симметризовать по нижним и по верхним индексам и выделить ненулевые следы, то получим представление (2, 2). Далее, два различных следа лишь по одной из пар индексов (напомним, что $\varphi_i^i=\chi_i^i=0$) после выделения ненулевых следов по оставшейся паре индексов, т. е. две функции

$$\varphi_i^j\chi_k^i-\frac{1}{3}\delta_k^j\varphi_i^l\chi_l^i \quad \text{и} \quad \varphi_i^j\chi_j^k-\frac{1}{3}\delta_i^k\varphi_l^j\chi_j^l,$$

преобразуются по двум представлениям (1, 1) и (1, 1). Полный след $\varphi_i^j\chi_j^i$ является унитарным скаляром, так что мы имеем представление (0, 0). Наконец, при выделении симметричных частей возникают две функции типа

$$\psi_{[ik]}^{\{jl\}}\equiv\varphi_i^j\chi_k^l+\varphi_k^j\chi_i^l-\varphi_i^l\chi_k^j-\varphi_k^l\chi_i^j \quad \text{и} \quad \psi_{\{ik\}}^{[jl]}=\varphi_i^j\chi_k^l+\varphi_i^l\chi_k^j-\varphi_k^j\chi_i^l-\varphi_k^l\chi_i^j,$$

содержащие по 10 независимых компонент каждая. Можно показать, что нижняя пара $\{ik\}$ эквивалентна одному верхнему индексу и наоборот, поэтому получаем представления (3, 0) и (0, 3). В правильности приведенного разложения можно убедиться, если сравнить размерности в левой и правой частях формулы (137,4г) : $8\times 8=1+8+8+10+10+27=64$. Остальные формулы (137,4) доказываются аналогично.

Группа $SU(3)$ имеет два инвариантных оператора, собственные значения которых могут служить для классификации неприводимых представлений. Но у нас представления уже однозначно охарактеризованы также двумя числами — $p$ и $q$. Поэтому выписывать и анализировать инвариантные операторы мы не будем; в дальнейшем они не потребуются.

Для классификации базисных элементов заданного мультиплета, в качестве которых можно выбрать определенные линей-

ные комбинации матриц $\varphi_{i_1 \ldots i_p}^{j_1 \ldots j_q}$ лишь с одним ненулевым элементом, будем использовать собственные значения диагональных генераторов $\Lambda_3$ и $\Lambda_8$. Из явных выражений типа (132,15) для генераторов $\Lambda_\alpha$ следует, что на функции $\varphi_{i_1 \ldots i_p}^{j_1 \ldots j_q}$ с одним отличным от нуля элементом они действуют так:

$$\Lambda_\alpha \varphi_{i_1 \ldots i_p}^{j_1 \ldots j_q} = \sum_{s=1}^{p} (\lambda_\alpha)_{i_s}^{i'_s} \varphi_{i_1 \ldots i_{s-1} i'_s i_{s+1} \ldots i_p}^{j_1 \ldots j_q} - \sum_{s=1}^{q} (\lambda_\alpha)_{j'_s}^{j_s} \varphi_{i_1 \ldots i_p}^{j_1 \ldots j_{s-1} j'_s j_{s+1} j_q} \qquad (137,5)$$

Пусть среди нижних $p$ индексов содержится $p_3$ индексов 3 и $p - p_3$ индексов 1 и 2, а среди верхних $q$ индексов имеется $q_3$ троек и $q - q_3$ единиц и двоек. Так как матрица $\lambda_8$ дает $1/\sqrt{3}$ в применении к каждому верхнему и нижнему индексу 1, 2 и $-2/\sqrt{3}$ в применении к любому индексу 3, то согласно (137,5) собственные значения генератора $\Lambda_8$ равны

$$\Lambda_8 = \sqrt{3}\left[\frac{p-q}{3} - p_3 + q_3\right]. \qquad (137,6)$$

Совершенно аналогично, для собственных значений генератора $\Lambda_3$ имеем

$$\Lambda_3 = (p_1 - p_2 - q_1 + q_2). \qquad (137,7)$$

Если бы среди индексов вообще не было троек, т. е. если бы рассматривалась группа $SU(2)$, то мы получили бы соотношения $p_1 + p_2 = p$ и $q_1 + q_2 = q$. В этом случае формула (137,7) превратилась бы в (132,25).

Однако двух указанных квантовых чисел (собственных значений операторов $\Lambda_3$ и $\Lambda_8$) для однозначной классификации базисных элементов мультиплета недостаточно. К ним можно добавить, например, собственное значение оператора $\underline{\Lambda}^2 \equiv \Lambda_1^2 + \Lambda_2^2 + \Lambda_3^2$. Из (137,2) следует, что

$$\underline{\lambda}^2 \equiv \lambda_1^2 + \lambda_2^2 + \lambda_3^2 = 3\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \qquad (137,8)$$

и поэтому матрица $\underline{\lambda}^2$ не коммутирует со всеми матрицами $\lambda_\alpha$. В силу того, что выражения для генераторов $\Lambda_\alpha$ полностью аналогичны приведенным в § 132 [см. (132,15)], это утверждение справедливо и для $\underline{\Lambda}^2$.

Поэтому ситуация с собственными значениями оператора $\underline{\Lambda}^2$ оказывается несколько более сложной, чем в двух предыдущих случаях: некоторым компонентам $\varphi_{i_1 \ldots i_p}^{j_1 \ldots j_q}$ может отвечать несколько собственных значений этого оператора, т. е. будет иметь место своеобразное вырождение. У мультиплетов, с которыми мы будем иметь дело, это происходит в случае $\Lambda_3 = \Lambda_8 = 0$. Если хотя бы одно из этих квантовых чисел не равно нулю, то, как легко показать,

$$\underline{\Lambda}^2 \varphi_{i_1 \ldots i_p}^{j_1 \ldots j_q} = (p_1 + p_2 + q_1 + q_2)(p_1 + p_2 + q_1 + q_2 + 2)\,\varphi_{i_1 \ldots i_p}^{j_1 \ldots j_q}. \quad (137,9)$$

Если же $\Lambda_3 = \Lambda_8 = 0$, то стоящий справа множитель определяет максимальное собственное значение оператора $\underline{\Lambda}^2$.

## § 138. Восьмеричный формализм и унитарные мультиплеты

Предположим, что в природе имеется некоторое сверхсильное взаимодействие элементарных частиц, которое инвариантно относительно группы $SU(3)$. Тогда волновые функции адронов должны преобразовываться по некоторым ее неприводимым представлениям, т. е. они являются произведениями обычных пространственно-спиновых волновых функций на унитарные матрицы $\varphi_{i_1 \ldots i_p}^{j_1 \ldots j_q}$. В результате все адроны будут размещены по унитарным мультиплетам, которые характеризуются парой чисел $p$ и $q$, спином, четностью, барионным числом и прочими величинами, не связанными с группой $SU(3)$ (ср. с § 133). Внутри мультиплета отдельные адроны классифицируются собственными значениями генераторов $\Lambda_3$ и $\Lambda_8$ и оператора $\underline{\Lambda}^2$, которые ниже будут отождествлены с $T_3$, $Y$ и $T$.

Если считать, что имеется только сверхсильное взаимодействие, то эти квантовые числа должны сохраняться, причем переходы в результате реакций возможны только внутри одного унитарного мультиплета, как это было и в случае изоспиновой инвариантности. Кроме того, должно иметь место квантовомеханическое вырождение, и массы частиц, входящих в один унитарный мультиплет, обязаны быть строго одинаковыми. С другой стороны, эксперимент показывает, что массы частиц, обладающих разными гиперзарядами (при одинаковых спине, четности и барионном числе) резко различаются, например, разность масс нуклона и $\Xi$-гиперона составляет примерно 30% от массы последнего. Это означает, что уже обычное сильное взаимодействие должно существенно нарушать $SU(3)$-инвариантность в гораздо большей степени, чем это делает электромагнитное взаимодействие в отношении изоспиновой симметрии. Но

в сильном взаимодействии $T$, $T_3$ и $Y$ все же сохраняются, что позволяет выявить трансформационные свойства гамильтониана взаимодействия, нарушающего симметрию, по отношению к унитарным преобразованиям из группы $SU(3)$. А это в свою очередь дает возможность получить определенные соотношения между массами частиц, входящих в один унитарный мультиплет.

Вместо генераторов $\Lambda_1$, $\Lambda_2$, $\Lambda_3$ и $\Lambda_8$ удобно ввести операторы

$$\hat{T}_1 = \frac{1}{2}\Lambda_1, \qquad \hat{T}_2 = \frac{1}{2}\Lambda_2, \qquad \hat{T}_3 = \frac{1}{2}\Lambda_3 \tag{138,1}$$

и

$$\hat{Y} = \frac{1}{\sqrt{3}}\Lambda_8. \tag{138,2}$$

Операторы $\hat{T}_1$, $\hat{T}_2$, $\hat{T}_3$ естественно отождествить с операторами проекций изоспина, а оператор

$$\underline{\hat{T}}^2 \equiv \hat{T}_1^2 + \hat{T}_2^2 + \hat{T}_3^2 = \frac{1}{4}\underline{\Lambda}^2 \tag{138,3}$$

— с оператором квадрата изоспина. Из (137,7) и (137,9) следует, что собственные значения $\hat{T}_3$ и $\underline{\hat{T}}^2$ равны [1])

$$T_3 = \frac{1}{2}(p_1 - p_2 - q_1 + q_2) \tag{138,4}$$

и

$$T(T+1) \doteq \frac{1}{4}(p_1 + p_2 + q_1 + q_2)(p_1 + p_2 + q_1 + q_2 + 2). \tag{138,5}$$

Оператор $\hat{Y} = \frac{1}{\sqrt{3}}\Lambda_8$ отождествим с оператором гиперзаряда, так что [см. (137,6)]:

$$Y = \frac{p-q}{3} - p_3 + q_3. \tag{138,6}$$

Такое отождествление не является однозначным и соответствует так называемому восьмеричному формализму или восьмеричному пути, предложенному в 1961 г. Гелл-Манном и независимо Нееманом. Его целесообразность оправдывается апостериори, так как в рамках восьмеричного формализма реальные элементарные частицы описываются наилучшим из всех возможных способов. Другой выбор оператора $\hat{Y}$ рассматривается в § 141.

Из (136,6) и из требуемой целочисленности гиперзаряда следует, что нужно рассматривать лишь такие представления группы $SU(3)$, для которых разность $p - q$ кратна трем:

$$p - q = 3n, \tag{138,7}$$

т. е. представления

$$(0,0) = 1, \quad (1,1) = 8, \quad (3,0) = 10, \quad (0,3) = \overline{10}, \quad (2,2) = 27 \tag{138,8}$$

[1]) С точностью до замечания, сделанного в конце § 137.

и так далее. Ввиду важности в рассматриваемом подходе представления $(1, 1) = 8$ он получил название восьмеричного формализма. Наконец, отметим, что в соответствии с соотношением Гелл-Манна — Нишиджимы (§§ 129, 133) положим по определению, что оператором заряда служит

$$\hat{Q} = \hat{T}_3 + \frac{1}{2}\hat{Y} = \frac{1}{2}\Lambda_3 + \frac{1}{2\sqrt{3}}\Lambda_8. \qquad (138{,}9)$$

Рассмотрим теперь конкретные унитарные мультиплеты адронов. Обратимся прежде всего к октуплету с волновой функцией $\varphi_i^j$ и исследуем его содержание по изоспину, его проекции $T_3$, гиперзаряду $Y$ и электрическому заряду $Q$. Пользуясь соотношениями (138,3) — (138,6) и (138,9), можно сразу составить следующую таблицу:

| Компонента | $T$ [1]) | $T_3$ | $Y$ | $Q$ | Мезон $0^-$ | Мезон $1^-$ | Барион |
|---|---|---|---|---|---|---|---|
| $\varphi_1^1$ | 1,0 | 0 | 0 | 0 | $\pi^0$, $\eta$ | $\rho^0$, $\omega$, $\varphi$ | $\Sigma^0$, $\Lambda$ |
| $\varphi_2^2$ | 1,0 | 0 | 0 | 0 | $\pi^0$, $\eta$ | $\rho^0$, $\omega$, $\varphi$ | $\Sigma^0$, $\Lambda$ |
| $\varphi_1^2$ | 1 | +1 | 0 | +1 | $\pi^+$ | $\rho^+$ | $\Sigma^+$ |
| $\varphi_2^1$ | 1 | −1 | 0 | −1 | $\pi^-$ | $\rho^-$ | $\Sigma^-$ |
| $\varphi_1^3$ | 1/2 | +1/2 | +1 | +1 | $K^+$ | $K^{*+}$ | $p$ |
| $\varphi_2^3$ | 1/2 | −1/2 | +1 | 0 | $K^0$ | $K^{*0}$ | $n$ |
| $\varphi_3^1$ | 1/2 | −1/2 | −1 | −1 | $\widetilde{K^+}$ | $\widetilde{K^{*+}}$ | $\Xi^-$ |
| $\varphi_3^2$ | 1/2 | +1/2 | −1 | 0 | $\widetilde{K^0}$ | $\widetilde{K^{*0}}$ | $\Xi^0$ |
| $\varphi_3^3$ | 0 | 0 | 0 | 0 | $\eta$ | $\omega$, $\varphi$ | $\Lambda$ |

[1]) См. замечание в конце § 137.

В последних трех колонках выписаны частицы — псевдоскалярные и векторные мезоны и барионы со спином 1/2, которые имеют соответствующие квантовые числа. Замечательным образом сюда вошли все стабильные псевдоскалярные мезоны, которых существует ровно 8, и все 8 стабильных барионов (кроме $\Omega^-$, спин которого равен 3/2). Поэтому естественно считать, что эти две группы частиц образуют как раз унитарные октуплеты.

Матрицы их волновых функций имеют следующий вид:

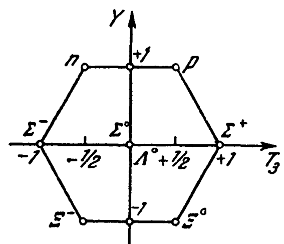
$$B_i^l=\begin{Vmatrix}\Sigma^0/\sqrt{2}+\Lambda/\sqrt{6} & \Sigma^+ & p\\ \Sigma^- & -\Sigma^0/\sqrt{2}+\Lambda/\sqrt{6} & n\\ \Xi^- & \Xi^0 & -2\Lambda/\sqrt{6}\end{Vmatrix};$$

$$M_i^l=\begin{Vmatrix}\pi^0/\sqrt{2}+\eta/\sqrt{6} & \pi^+ & K^+\\ \pi^- & -\pi^0/\sqrt{2}+\eta/\sqrt{6} & K^0\\ \tilde{K}^+ & \tilde{K}^0 & -2\eta/\sqrt{6}\end{Vmatrix}. \qquad (138{,}10)$$

Выбор именно таких коэффициентов диктуется требованием равенства нулю следа матрицы и соображениями нормировки (см. § 133). В мезонный октуплет вошли наряду с частицами и античастицы. Это объясняется тем, что теперь не осталось квантовых чисел, не входящих в группу $SU(3)$, с помощью которых можно было бы отличить, скажем, $K^+$ и $\tilde{K}^+$ (ср. с § 133). Для барионов же такое число существует — это барионное число $B$, так что соответствующие им античастицы образуют самостоятельный октуплет:

$$\tilde{B}_i^l=\begin{Vmatrix}\tilde{\Sigma}^0/\sqrt{2}+\tilde{\Lambda}/\sqrt{6} & \tilde{\Sigma}^- & \tilde{\Xi}^-\\ \tilde{\Sigma}^+ & -\tilde{\Sigma}^0/\sqrt{6}+\tilde{\Lambda}/\sqrt{6} & \tilde{\Xi}^0\\ \tilde{p} & \tilde{n} & -2\tilde{\Lambda}/\sqrt{6}\end{Vmatrix}. \qquad (138{,}11)$$

Унитарные мультиплеты удобно изображать на диаграммах, называемых весовыми; при этом выбирается прямоугольная система, по одной оси которой откладывается гиперзаряд, а по другой — проекция изоспина. Так, например, для барионного октуплета имеем:

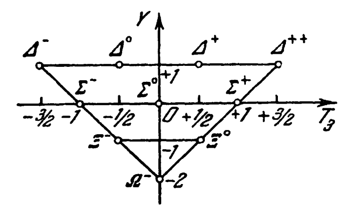



Ситуация с векторными мезонами несколько сложнее, так как на место, аналогичное тому, которое занимает η-мезон или Λ-гиперон, имеются два претендента — ω и φ. Эту ситуацию мы обсудим в конце параграфа.

Составим теперь таблицу квантовых чисел частиц, которые могут входить в состав декуплета, волновая функция которого есть $\varphi_{[ijk]}$.

| Компонента | $T$ | $T_3$ | $Y$ | $Q$ | Барион $3/2^+$ |
|---|---|---|---|---|---|
| $\varphi_{111}$ | 3/2 | +3/2 | +1 | +2 | $\Delta^{++}_{1236}$ |
| $\varphi_{112}$ | 3/2 | +1/2 | +1 | +1 | $\Delta^{+}_{1236}$ |
| $\varphi_{122}$ | 3/2 | −1/2 | +1 | 0 | $\Delta^{0}_{1236}$ |
| $\varphi_{222}$ | 3/2 | −3/2 | +1 | −1 | $\Delta^{-}_{1236}$ |
| $\varphi_{113}$ | 1 | +1 | 0 | +1 | $\Sigma^{+}_{1385}$ |
| $\varphi_{123}$ | 1 | 0 | 0 | 0 | $\Sigma^{0}_{1385}$ |
| $\varphi_{223}$ | 1 | −1 | 0 | −1 | $\Sigma^{-}_{1385}$ |
| $\varphi_{133}$ | 1/2 | +1/2 | −1 | 0 | $\Xi^{0}_{1530}$ |
| $\varphi_{233}$ | 1/2 | −1/2 | −1 | −1 | $\Xi^{-}_{1530}$ |
| $\varphi_{333}$ | 0 | 0 | −2 | −1 | ? |

В тот момент, когда была составлена аналогичная таблица (1961—1962 гг.), место, в котором стоит знак вопроса, оставалось незанятым, так как не было известно ни одной частицы с гиперзарядом —2. Таким образом, восьмеричный формализм предсказал существование нового гиперона со спином $3/2^+$ и с указанными в таблице квантовыми числами. Мало того, приблизительно была известна и масса этой частицы (см. § 140) — примерно 1680 *Мэв*. И в начале 1964 г. такая частица была действительно открыта — это довольно стабильный $\Omega$-гиперон (см. таблицу элементарных частиц, приведенную в § 142). Это обстоятельство уничтожило все сомнения в истинности восьмеричного формализма и вообще унитарной симметрии, которая ныне является столь же классической, как и изоспиновая. Весовая диаграмма для декуплета имеет такой вид:




Формулой (138,7) допускается и существование унитарных синглетов. Так как в этом случае все генераторы обращаются

в нуль, то для унитарно скалярной частицы $T = T_3 = Y = Q = 0$. Однако среди множества резонансных состояний нет пока ни одного, волновую функцию которого можно было бы с полной достоверностью рассматривать в качестве унитарного скаляра.

Зато унитарные синглеты играют решающую роль в разрешении упомянутой выше трудности с векторными мезонами. Можно считать, что реальные ω- и φ-мезоны представляют различные суперпозиции унитарно синглетного состояния $\varphi'$ и октуплетного состояния $\omega'$, аналогичного η-мезону. В случае строгой унитарной симметрии такое смешивание компонент из мультиплетов разной природы запрещено, но в результате нарушения $SU(3)$-симметрии реальным сильным взаимодействием оно уже не является невозможным. Таким образом, векторные мезоны образуют не октуплет, а нонуплет. По этому поводу мы ограничимся лишь сделанными замечаниями общего характера, отсылая читателя к литературе.

Перечислим теперь без каких-бы то ни было комментариев некоторые унитарные мультиплеты, по которым размещаются резонансы. Оказывается, что существует семейство из девяти мезонов $2^+$ (в него входит, в частности, упоминавшийся в § 129 $f^0$-мезон), которые также образуют нонуплет. Несколько более сомнительными являются нонуплет мезонов $1^+$, октуплет барионных резонансов $3/2^-$ и октуплеты барионных резонансов $5/2^+$ и $7/2^+$. Для окончательного решения вопроса пока не хватает данных.

## § 139. Некоторые следствия строгой унитарной симметрии

В этом параграфе кратко описываются некоторые физические следствия гипотезы строгой унитарной симметрии адронов. Следует сразу же подчеркнуть, что они не могут претендовать на хорошее согласие с экспериментальными данными, так как уже реальное сильное взаимодействие в значительной степени нарушает $SU(3)$-инвариантность теории. Более реалистическая схема в общих чертах описывается в следующем параграфе.

Рассмотрим прежде всего взаимодействие стабильных барионов спина $1/2^+$ (октуплет $B_i^l$) с псевдоскалярными мезонами (октуплет $M_i^l$). В квантовой теории поля барионные и мезонные функции считаются операторами в пространстве чисел заполнения. Аналогично тому, как это делалось в § 135, плотность гамильтониана взаимодействия следует строить в виде инвариантной комбинации функций $\overline{B}_i^l$, $B_k^l$ и $M_m^n$. Прежде всего образуем из этих функций унитарные скаляры. Замечая, что из $\overline{B}_i^l$ и $B_k^l$

можно сконструировать два октуплета

$$\overline{B}{}^j_i B^k_j - \frac{1}{3}\delta^k_i \overline{B}{}^j_m B^m_j \quad \text{и} \quad \overline{B}{}^k_j B^j_i - \frac{1}{3}\delta^k_i \overline{B}{}^m_j B^j_m,$$

свернем эти матрицы с мезонной функцией $M^i_k$. Учитывая, что

$$\delta^k_i M^i_k = M^i_i = 0,$$

приходим к двум унитарным скалярам

$$\overline{B}{}^j_i B^k_j M^i_k \quad \text{и} \quad \overline{B}{}^k_j B^j_i M^i_k,$$

которыми и исчерпываются возможные инварианты. Обычно выбирают их сумму и разность, так что барион-мезонное взаимодействие описывается следующей плотностью гамильтониана:

$$\hat{H}_{\text{int}} = \frac{1}{\sqrt{2}} g^{(F)} \left[\overline{B}{}^j_i \gamma_5 B^k_j - \overline{B}{}^k_j \gamma_5 B^j_i\right] M^i_k + \\ + \frac{1}{\sqrt{2}} g^{(D)} \left[\overline{B}{}^j_i \gamma_5 B^k_j + \overline{B}{}^k_j \gamma_5 B^j_i\right] M^i_k \qquad (139,1)$$

(матрица $\gamma_5$ введена из тех же соображений, что в § 135), содержащей две независимые константы связи $g^{(F)}$ и $g^{(D)}$). По определенным причинам первый член гамильтониана (139,1) называется $F$-связью, второй $D$-связью.

Используя (138,10)—(138,11), запишем компоненты барионной и мезонной матрицы через волновые функции изомультиплетов:

$$B_{33} = -\frac{2}{\sqrt{6}}\Lambda, \quad B^a_b = \Sigma^a_b + \frac{1}{\sqrt{6}}\Lambda\delta^a_b, \quad B^3_a = N_a, \quad B^a_3 = \Xi^a;$$

$$\overline{B}_{33} = -\frac{2}{\sqrt{6}}\overline{\Lambda}, \quad \overline{B}{}^a_b = \overline{\Sigma}{}^a_b + \frac{1}{\sqrt{6}}\overline{\Lambda}\delta^a_b, \quad \overline{B}{}^3_a = \overline{\Xi}_a, \quad \overline{B}{}^a_3 = \overline{N}{}^a;$$

$$M^3_3 = -\frac{2}{\sqrt{6}}\eta, \quad M^a_b = \pi^a_b + \frac{1}{\sqrt{6}}\eta\delta^a_b, \quad M^3_a = K_a, \quad M^a_3 = \widetilde{K}{}^a$$

($a$, $b = 1{,}2$ — изоспиновые индексы). Подставляя их в (139,1), получим:

$$\hat{H}_{\text{int}} = -\sqrt{2}\, g^{(F)} \pi^c_a \overline{\Sigma}{}^b_c \gamma_5 \Sigma^a_b + \frac{1}{\sqrt{2}}\left(g^{(D)} + g^{(F)}\right) \pi^c_a \overline{N}{}^a \gamma_5 N_c + \\ + \frac{1}{\sqrt{2}}\left(g^{(D)} - g^{(F)}\right) \pi^c_a \overline{\Xi}_c \gamma_5 \Xi^a + \frac{1}{\sqrt{3}} g^{(D)} \pi^c_a \left[\overline{\Lambda}\gamma_5 \Sigma^a_c + \overline{\Sigma}{}^a_c \gamma_5 \Lambda\right] + \\ + \sqrt{\frac{2}{3}}\, g^{(D)} \eta \overline{\Sigma}{}^a_b \gamma_5 \Sigma^b_a + \frac{1}{2\sqrt{3}}\left(3g^{(F)} - g^{(D)}\right) \eta \overline{N}{}^a \gamma_5 N_a - \\ - \frac{1}{2\sqrt{3}}\left(3g^{(F)} + g^{(D)}\right) \eta \overline{\Xi}_a \gamma_5 \Xi^a - \sqrt{\frac{2}{3}}\, g^{(D)} \eta \overline{\Lambda} \gamma_5 \Lambda +$$

$$+\frac{1}{\sqrt{2}}\left(g^{(D)}+g^{(F)}\right)K_a\overline{\Sigma}{}^a_b\gamma_5\Xi^b+\frac{1}{\sqrt{2}}\left(g^{(D)}+g^{(F)}\right)\tilde{K}^a\overline{\Xi}_b\gamma_5\Sigma^b_a+$$
$$+\frac{1}{\sqrt{2}}\left(g^{(D)}-g^{(F)}\right)K_a\overline{N}{}^b\gamma_5\Sigma^a_b+\frac{1}{\sqrt{2}}\left(g^{(D)}-g^{(F)}\right)\tilde{K}^a\overline{\Sigma}{}^b_a\gamma_5N_b+$$
$$+\frac{1}{2\sqrt{3}}\left(3g^{(F)}-g^{(D)}\right)K_a\overline{\Lambda}\gamma_5\Xi^a+\frac{1}{2\sqrt{3}}\left(3g^{(F)}-g^{(D)}\right)\tilde{K}^a\overline{\Xi}_a\gamma_5\Lambda-$$
$$-\frac{1}{2\sqrt{3}}\left(3g^{(F)}+g^{(D)}\right)K_a\overline{N}{}^a\gamma_5\Lambda-\frac{1}{2\sqrt{3}}\left(3g^{(F)}+g^{(D)}\right)\tilde{K}^a\overline{\Lambda}\gamma_5N_a. \qquad (139,2)$$

Таким образом, 12 констант $\Sigma\Sigma\pi$, $NN\pi$, $\Sigma\Lambda\pi$, $\Xi\Xi\pi$, $\Sigma\Sigma\eta$, $NN\eta$, $\Xi\Xi\eta$, $\Lambda\Lambda\eta$, $\Sigma\Xi K$, $N\Sigma K$, $\Lambda\Xi K$, $N\Lambda K$ — связи выражаются всего через два параметра $g^{(F)}$ и $g^{(D)}$. Каждое слагаемое, входящее в (139,2), инвариантно относительно изоспиновых преобразований, и его можно расписать в явном виде (см. § 135), в результате чего возникает 64 члена, каждый из которых отвечает взаимодействию конкретных барионов с мезоном.

Рассмотрим теперь, как в унитарно-инвариантной теории получаются соотношения между сечениями различных процессов. Пусть имеется несколько реакций

$$a_i+b_i\rightarrow c_i+d_i,$$

причем частицы $a_i$, $b_i$, $c_i$ и $d_i$ принадлежат унитарным мультиплетам $(p^{(a)}, q^{(a)})$, $(p^{(b)}, q^{(b)})$, $(p^{(c)}, q^{(c)})$ и $(p^{(d)}, q^{(d)})$ соответственно. В соответствии с общей схемой, описанной в § 136, для получения соотношений между амплитудами указанных реакций нужно действовать следующим образом.

1. Разлагаем прямые произведения представлений $(p^{(a)}, q^{(a)})\otimes\otimes(p^{(b)}, q^{(b)})$ и $(p^{(c)}, q^{(c)})\otimes(p^{(d)}, q^{(d)})$ на неприводимые представления.

2. Выписываем независимые амплитуды, соответствующие переходу из некоторого мультиплета первого разложения в такой же мультиплет второго разложения.

3. Разлагаем, пользуясь таблицей коэффициентов Клебша — Гордана группы $SU(3)$, волновые функции $|a_ib_i\rangle$ и $|c_id_i\rangle$ начального и конечного состояний по базисным функциям мультиплетов, входящих в соответствующие разложения. Эти функции определяются типом представления и собственными значениями операторов изоспина и его проекции и оператора гиперзаряда, так что их следует записывать в виде $|p, q; T, T_3, Y\rangle$.

4. Подставляем разложения волновых функций в матричный элемент перехода $\langle c_id_i|a_ib_i\rangle$, в результате чего он оказывается выраженным через сравнительно небольшое число выписанных в п. 2 матричных элементов переходов между однотипными мультиплетами.

В качестве примера рассмотрим рассеяние псевдоскалярных мезонов на стабильных барионах спина 1/2 (легко сосчитать, что всего имеется 27 таких процессов). В этом случае все частицы и начального и конечного состояния принадлежат октуплетам. Пользуясь разложением (137,4г), заключаем, что имеется восемь независимых амплитуд, соответствующих переходам

$$1 \to 1,\ \ 10 \to 10,\ \ \overline{10} \to \overline{10},\ \ 27 \to 27,\ \ 8' \to 8',\ \ 8 \to 8,\ \ 8 \to 8',\ \ 8' \to 8.$$

Однако, используя инвариантность теории относительно обращения времени, можно показать, что две последние амплитуды выражаются друг через друга, так что независимых имеется семь амплитуд, через которые и выражаются 27 амплитуд реальных процессов.

В случае рассеяния псевдоскалярных мезонов на барионах $1/2^+$ с образованием псевдоскалярного мезона и барионного резонанса $3/2^+$, например,

$$\pi^+ + p \to \eta + \Delta^{++},$$

для начального состояния имеем разложение (137,4г), а для конечного — (137,4д), так что амплитуды реальных процессов выражаются всего через четыре независимые амплитуды переходов:

$$8 \to 8, \quad 8' \to 8, \quad 10 \to 10, \quad 27 \to 27.$$

Однако таблицы коэффициентов Клебша — Гордана группы $SU(3)$ весьма громоздки и в каждом конкретном случае гораздо удобнее пользоваться методом инвариантных амплитуд, описанным в конце § 136. Рассмотрим опять рассеяние псевдоскалярных мезонов на барионах $1/2^+$. Полная амплитуда рассеяния, которая в нашем случае должна строиться из волновых функций $B^j_i$ и $M^l_k$ начального состояния из волновых функций $\overline{B}^j_i$ и $\overline{M}^l_k$ конечного состояния, является унитарным инвариантом наиболее общего вида. Ее можно записать в виде следующей комбинации из девяти скалярных слагаемых:

$$\begin{aligned} f = f_1(\overline{B}B)(\overline{M}M) + f_2(\overline{B}M)(\overline{M}B) + f_3(\overline{B}\overline{M})(BM) + \\ + f_5(\overline{B}BM\overline{M}) + f_5(\overline{B}B\overline{M}M) + f_6(\overline{B}M\overline{M}B) + \\ + f_7(\overline{B}\overline{M}MB) + f_8(\overline{B}MB\overline{M}) + f_9(\overline{B}\overline{M}BM). \quad (139,3) \end{aligned}$$

Для краткости взятие следа от произведения матриц типа $B$ и $M$ обозначено здесь круглыми скобками, так что, например,

$$(\overline{B}B)(\overline{M}M) \equiv \overline{B}^l_i B^i_j \overline{M}^l_k M^k_l,$$

$$(\overline{B}\overline{M}BM) \equiv \overline{B}^i_i \overline{M}^k_j B^l_k M^i_l \quad \text{и т. д.}$$

Входящие в амплитуду (139,3) величины $f_\alpha$ являются неизвестными, но одинаковыми для всех мезон-барионных процессов, функциями пространственно-спиновых переменных.

Мы уже знаем, что рассматриваемые процессы описываются восемью независимыми амплитудами (без учета инвариантности относительно обращения времени). Поэтому между девятью инвариантами, входящими в (139,3), должно существовать одно соотношение. Оно действительно есть:

$$(\bar{B}B)(\bar{M}M)+(\bar{B}M)(\bar{M}B)+(\bar{B}\bar{M})(BM)=$$
$$=(\bar{B}B\bar{M}M)+(\bar{B}BM\bar{M})+(\bar{B}\bar{M}MB)+(\bar{B}M\bar{M}B)+$$
$$+(\bar{B}MB\bar{M})+(\bar{B}\bar{M}BM), \qquad (139,4)$$

в чем нетрудно убедиться непосредственным расчетом. Вообще говоря, установление соотношений типа (139,4) практически оказывается затруднительным, но это и несущественно, так как если считать все девять слагаемых формально независимыми, в окончательные результаты функции $f_\alpha$ автоматически войдут в виде ровно восьми независимых комбинаций.

Как известно, при операции обращения времени всякая волновая функция переходит в комплексно сопряженную, причем начальное и конечное состояния переставляются[1]); в нашем случае

$$B_i^l,\ \bar{B}_{i'}^{l'},\ M_k^l,\ \bar{M}_{k'}^{l'} \to B_{i'}^{l'},\ \bar{B}_i^l,\ M_{k'}^{l'},\ \bar{M}_k^l. \qquad (139,5)$$

При такой замене первые семь членов в (139,3) не изменяются, а два последних переходят друг в друга, так что из инвариантности относительно обращения времени следует $f_8 = f_9$, причем с учетом соотношения (139,4) их можно положить равными нулю и работать лишь с семью первыми инвариантными амплитудами.

Теперь с помощью процедуры, полностью аналогичной той, которая описана в конце § 136, амплитуды всех 27-ми реальных процессов можно выразить через семь независимых функций $f_\alpha$, например,

$$\begin{aligned}
&f(\pi^- p \to K^+\Sigma^-) = f_3,\\
&f(\tilde{K}^0 p \to K^+\Xi^0) = f_3,\\
&f(K^- p \to K^- p) = f_1 + f_2 + f_4 + f_6, \qquad (139,6)\\
&f(\pi^- p \to \pi^- p) = f_1 + f_6,\\
&f(K^- p \to \pi^-\Sigma^+) = f_2 + f_4 \text{ и т. д.}
\end{aligned}$$

---

[1]) См., например, Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, Квантовая механика, Физматгиз, 1963.

Исключая функции $f_\alpha$, будем иметь соотношения между амплитудами различных процессов. Так, из (139,6) следует:

$$f(\pi^- p \to K^+\Sigma^-) = f(\tilde{K}^0 p \to K^+\Xi^0), \tag{139,7}$$

и

$$f(K^- p \to K^- p) - f(\pi^- p \to \pi^- p) = f(K^- p \to \pi^-\zeta^+) \tag{139,8}$$

откуда для сечений получается, что

$$\sigma(\pi^- p \to K^+\Sigma^-) = \sigma(\tilde{K}^0 p \to K^+\Xi^0) \tag{139,9}$$

и

$$\sqrt{\sigma(\pi^- p \to \pi^- p)} - \sqrt{\sigma(K^- p \to K^- p)} \leqslant \sqrt{\sigma(K^- p \to \pi^-\Sigma^+)}. \tag{139,10}$$

Сечение, стоящее в левой части равенства (139,9), имеет большое значение, а сечение справа является малым, так что при анализе этих процессов нужно существенно учитывать нарушение унитарной симметрии сильными взаимодействиями. С другой стороны, неравенство (139,10) во всей энергетической области выполняется. Мало того, при высоких энергиях, когда сечение $\sigma(K^- p \to \pi^-\Sigma^+)$ весьма мало́, (139,10) переходит в равенство

$$\sigma(\pi^- p \to \pi^- p) \cong \sigma(K^- p \to K^- p), \tag{139,10a}$$

которое хорошо согласуется с экспериментальными данными.

Следует заметить, что интерпретация теоретических предсказаний строгой унитарной симметрии и их сравнение с экспериментом является достаточно сложным делом, так как предварительно нужно выяснить, в какой энергетической области можно пренебречь нарушением $SU(3)$-инвариантности. Кроме того, в сечения различных процессов входят кинематические множители, которые различны, так как содержат массы частиц, участвующих в реакциях. С другой стороны, выписанные выше соотношения предполагают равенство масс частиц, входящих в один мультиплет. Поэтому из соотношений между амплитудами фактически получаются соотношения не между сечениями, а между их отношениями к кинематическим факторам, так что из эксперимента следует брать некоторые «исправленные» значения сечений.

## § 140. Понятие о нарушенной унитарной симметрии

Выше неоднократно подчеркивалось, что реальное сильное взаимодействие нарушает строгую унитарную симметрию, но в пренебрежении электромагнетизмом изоспин $T$ и гиперзаряд $Y$ еще сохраняются. Поэтому плотность гамильтониана взаимодействия не может быть унитарным скаляром, но должна быть

изоскаляром ($T = 0$) и отвечать нулевому гиперзаряду ($Y = 0$). Таким образом, среди компонент унитарных мультиплетов следует отыскать такие, для которых $T = Y = 0$. Из формулы (138,5) для максимального значения изоспина видно, что все индексы этих компонент должны быть тройками, так что выполняются равенства $p_3 = p$ и $q_3 = q$. Но тогда из выражения (138,6) для гиперзаряда сразу приходим к условию $p - q = 0$. Так, нулевыми изоспином и гиперзарядом обладают только компоненты симметричных мультиплетов типа $(p, p)$, т. е. мультиплетов $(1,1) = 8$, $(2,2) = 27$ и т. д., каждый индекс которых равен 3. Поэтому плотность гамильтониана сильного взаимодействия должна иметь следующую общую структуру:

$$\hat{H}_{\text{int}} = g_0 \hat{H}_0 + g_1 \hat{H}_3^3 + g_2 \hat{H}_{33}^{33} + \ldots \qquad (140,1)$$

Как только введены нарушающие унитарную симметрию члены, существовавшее ранее квантовомеханическое вырождение должно сняться, т. е. массы частиц, принадлежащих одному мультиплету, расщепятся. Для вывода массовых формул введем оператор $\hat{M}$, собственные значения которого равны массам изомультиплетов с определенным гиперзарядом (вследствие изоспиновой инвариантности от проекции $T_3$ они не зависят):

$$\hat{M} | p, q; T, Y \rangle = m | p, q; T, Y \rangle. \qquad (140,2)$$

В предположении строгой унитарной симметрии массовый оператор будет инвариантом группы $SU(3)$, и его собственные значения в данном мультиплете будут одинаковыми. Естественно считать, что при нарушении унитарной симметрии $\hat{M}$ приобретает структуру, аналогичную (140,1), причем будет считаться, что $g_2 \ll g_1$, откуда

$$\hat{M} = \hat{M}_0 + \hat{M}_3^3. \qquad (140,3)$$

Удобно ввести матрицу $M$ массового оператора

$$M = \langle p, q; T', Y' | \hat{M} | p, q; T, Y \rangle, \qquad (140,4)$$

которая вследствие (140,2) диагональна, причем ее элементы определяют массы членов мультиплета. Эта матрица представляет некоторую билинейную комбинацию волновой функции $\varphi_{i_1 \ldots i_p}^{j_1 \ldots j_q}$ данного мультиплета $(p, q)$ и волновой функции $\bar{\varphi}_{j'_1 \ldots j'_q}^{i'_1 \ldots i'_p}$ сопряженного мультиплета $(q, p)$. Из (140,3) следует, что она должна содержать инвариантную часть и слагаемое, соответствующее $3 - 3$-компоненте октуплета. Из указанных

волновых функций можно построить один скаляр

$$m_0\bar{\varphi}^{i_1\dots i_q}_{j_1\dots j_q}\varphi^{j_1\dots j_q}_{i_1\dots i_p}$$

и два октуплета

$$a_1\bar{\varphi}^{i_1\dots i_{p-1}j}_{j_1\dots j_q}\varphi^{j_1\dots j_q}_{i_1\dots i_{p-1}i} - \frac{a_1}{3}\delta^j_i\bar{\varphi}^{i_1\dots i_p}_{j_1\dots j_q}\varphi^{j_1\dots j_q}_{i_1\dots i_p}$$

и

$$a_2\bar{\varphi}^{i_1\dots i_p}_{j_1\dots j_{q-1}i}\varphi^{j_1\dots j_{q-1}j}_{i_1\dots i_p} - \frac{a_2}{3}\delta^j_i\bar{\varphi}^{i_1\dots i_p}_{j_1\dots j_p}\varphi^{j_1\dots j_q}_{i_1\dots i_p},$$

поэтому

$$M = a_0\bar{\varphi}^{i_1\dots i_r}_{j_1\dots j_q}\varphi^{j_1\dots j_q}_{i_1\dots i_p} + a_1\bar{\varphi}^{i_1\dots i_{p-1},3}_{j_1\dots j_q}\varphi^{j_1\dots j_q}_{i_1\dots i_{p-1},3} + a_2\bar{\varphi}^{i_1\dots i_p}_{j_1\dots j_{q-1},3}\varphi^{j_1\dots j_{q-1},3}_{i_1\dots i_p}, \qquad (140,5)$$

где $a_0 \equiv m_0 - \frac{a_1 + a_2}{3}$, а $m_0$, $a_1$, $a_2$ — некоторые параметры. Таким образом, в общем случае массовая формула содержит максимум три параметра (для мультиплетов типа $(3n, 0)$ и $(0, 3n)$ только два, так как в этих случаях имеются лишь верхние или нижние индексы), из которых $m_0$ отвечает массе членов мультиплета в предположении строгой унитарной симметрии. Заметим, что согласно Фейнману для бозонных мультиплетов вместо матрицы $M$ нужно рассматривать матрицу $M^2$, так как бозоны, в отличие от фермионов, подчиняются уравнению второго порядка.

Для октуплета барионов спина $1/2^+$ формула (140,5) переходит в такую:

$$M = a_0\bar{B}^i_jB^j_i + a_1\bar{B}^3_jB^j_3 + a_2\bar{B}^i_3B^3_i. \qquad (140,6)$$

Используя (138,10) и вычисляя матричные элементы, соответствующие каждому бариону, получим

$$m_N = a_0 + a_2,$$
$$m_\Xi = a_0 + a_1,$$
$$m_\Sigma = a_0,$$
$$m_\Lambda = a_0 + \frac{2}{3}(a_1 + a_2).$$

Отсюда следует массовая формула Гелл-Манна

$$3m_\Lambda + m_\Sigma = 2(m_N + m_\Xi), \qquad (140,7)$$

которая хорошо согласуется с опытом: справа 4518 *Мэв*, слева 4535 *Мэв*, т. е. точность примерно 0,4%. Учитывая, что в октуплете псевдоскалярных мезонов на месте нуклона стоит $K$-мезон, а на месте $\Xi$-гиперона $\bar{K}$-мезон, причем массы $K$ и $\bar{K}$

равны, из аналога (140,7) имеем

$$3m_\eta^2 + m_\pi^2 = 4m_K^2. \qquad (140,7')$$

Это соотношение согласуется с опытом с точностью 5%. В случае векторных мезонов ситуация осложняется наличием $\omega - \varphi$-смешивания (см. § 138), и мы ее обсуждать не будем.

Для декуплета частиц спина $3/2^+$ формула (140,5) переходит в

$$M = b_0 \overline{B}^{ijk} B_{ijk} + b_1 \overline{B}^{3ij} B_{3ij}, \qquad (140,8)$$

откуда, используя результаты § 138, получим

$$m_\Delta = b_0,$$

$$m_{\Sigma^*} = b_0 + \frac{1}{3} b_1,$$

$$m_{\Xi^*} = b_0 + \frac{2}{3} b_1,$$

$$m_\Omega = b_0 + b_1.$$

Из этих формул следует правило интервалов

$$m_{\Sigma^*} - m_\Delta = m_{\Xi^*} - m_{\Sigma^*} = m_\Omega - W_{\Xi^*}. \qquad (140,9)$$

Для первого равенства имеем 147 и 145 *Мэв* (точность порядка 1%), а из второго можно предсказать массу $\Omega^-$-гиперона — 1676 *Мэв*, что было блестяще подтверждено экспериментом: $m_\Omega$ = 1675 *Мэв*.

Окубо вывел общую массовую формулу, справедливую для всех унитарных мультиплетов:

$$m^{2-|B|} = a(p,\ q) + b(p,\ q)\,BY + c(p,\ q)\left[T(T+1) - \frac{1}{4}Y^2\right]. \qquad (140,10)$$

В случае нарушенной $SU(3)$-симметрии амплитуды рассеяния одного унитарного мультиплета на другом уже не будут инвариантными; наряду со скалярной частью они будут содержать 3-3 компоненты октуплета. Для примера распишем первый член в формуле (139,3), который теперь принимает вид

$$f_1 = f_{1,0}(\overline{B}B)(\overline{M}M) + f_{1,1}\overline{B}_i^3 B_3^i(\overline{M}M) + f_{1,2}\overline{B}_3^i B_i^3 +$$
$$+ f_{1,3}(\overline{B}B)\,\overline{M}_i^3 M_3^i + f_{1,4}(\overline{B}B)\,\overline{M}_3^i M_i^3. \qquad (140,11)$$

Ввиду огромного количества независимых произвольных параметров, возникающих в такой схеме, ее эвристическая ценность резко падает, так как доставляемая ею физическая информация становится весьма малой.

Однако если принять правдоподобную и оправданную экспериментально гипотезу Л. Б. Окуня и И. Я. Померанчука, что

асимптотически при очень высоких энергиях сечения неупругих процессов, идущих с перезарядкой, пренебрежимо малы по сравнению с сечениями обычного упругого рассеяния, то в этой энергетической области в (139,3) останется лишь первый член. Тогда, в предположении строгой унитарной симметрии, получим асимптотическое равенство амплитуд упругого рассеяния $\pi$-, $\eta$-, $K$- и $\tilde{K}$-мезонов на барионах:

$$f_\pi^\infty = f_\eta^\infty = f_K^\infty = f_{\tilde{K}}^\infty. \qquad (140,12)$$

В случае нарушенной симметрии нужно использовать формулу (140,11), откуда следует соотношение между амплитудами, аналогичное массовому:

$$f_\pi^\infty + 3f_\eta^\infty = 2\left(f_K^\infty + f_{\tilde{K}}^\infty\right). \qquad (140,13)$$

В заключение этого параграфа заметим, что примерно таким же способом можно исследовать изоспиновую симметрию, нарушенную электромагнитным взаимодействием с плотностью гамильтониана (135,10). Предоставляем читателю в качестве полезного упражнения самостоятельно получить, например, следующие формулы для изомультиплета $\Sigma$ и изоквартета $\Delta$:

$$m_{\Sigma^0} = \frac{1}{2}\left(m_{\Sigma^+} + m_{\Sigma^-}\right) \qquad (140,14)$$

и

$$m_{\Delta^{++}} - m_{\Delta^-} = 3\left(m_{\Delta^+} - m_{\Delta^0}\right). \qquad (140,15)$$

## § 141. Составные модели в схеме унитарной симметрии. Кварки

В начале § 134 упоминалось, что $\pi$-мезон (вообще говоря, и все прочие нестранные адроны) можно мыслить как частицу, состоящую из нуклона и антинуклона. Естественно попытаться сформулировать аналогичную «минимальную» модель, в которой все адроны конструируются из небольшого числа каких-то частиц, объявляемых в известном смысле фундаментальными. Для этого к нуклону, носителю барионного числа и изоспина (а значит, и электрического заряда), необходимо добавить еще по крайней мере одну частицу, которая обладала бы странностью. Наиболее экономную модель такого типа предложил в 1956 г. Саката, который в качестве фундаментальных частиц выбрал $p$, $n$, $\Lambda$ и $\tilde{p}$, $\tilde{n}$, $\tilde{\Lambda}$ и предположил, что между любым фундаментальным барионом и антибарионом существует притяжение, а между двумя барионами или антибарионами — отталкивание. Волновые функции известных в то время адронов

строились следующим образом:

$$\pi^+ = p\tilde{n}, \quad \pi^- = \tilde{p}n, \quad \pi^0 = \frac{1}{\sqrt{2}}(p\tilde{p} - n\tilde{n}),$$

$$K^+ = p\tilde{\Lambda}, \quad K^0 = n\tilde{\Lambda}, \; K^- = \tilde{p}\Lambda, \; \tilde{K}^0 = \tilde{n}\Lambda; \tag{141,1}$$

$$\Sigma^+ = p\tilde{n}\Lambda = \pi^+\Lambda,$$

$$\Sigma^- = \tilde{p}n\Lambda = \pi^-\Lambda, \; \Sigma^0 = \frac{1}{\sqrt{2}}(p\tilde{p} - n\tilde{n})\,\Lambda = \pi^0\Lambda;$$

$$\Xi^- = \tilde{p}\Lambda\Lambda = K^-\Lambda, \; \Xi^0 = \tilde{n}\Lambda\Lambda = \tilde{K}^0\Lambda.$$

Эта модель развивалась Марковым, Окунем и другими учеными, и с ее помощью удалось получить большое количество интересных физических результатов.

Оказалось, что модель Сакаты очень хорошо укладывается в схему унитарной симметрии, если пренебречь различием в массах нуклона и $\Lambda$-гиперона. Для этого достаточно считать, что эти частицы образуют триплет (1,0), а соответствующие античастицы — сопряженный триплет (0,1):

$$S_i = \begin{pmatrix} p \\ n \\ \Lambda \end{pmatrix}; \qquad \tilde{S}^i = (\tilde{p}, \; \tilde{n}, \; \tilde{\Lambda}). \tag{141,2}$$

Оператор проекции изоспина (138,1) для $p$, $n$ и $\Lambda$ дает правильные значения $+1/2$, $-1/2$ и 0, но оператор гиперзаряда (138,2) нужно модифицировать так, чтобы вместо дробных значений он приводил к $Y = +1, \; +1, \; 0$ соответственно. Положим, по определению,

$$\hat{Y} = \frac{1}{\sqrt{3}}\Lambda_8 + \frac{2}{3}B\hat{I}, \tag{141,3}$$

так что вместо (138,6) теперь будем иметь

$$Y = \frac{p-q}{3} - p_3 + q_3 + \frac{2}{3}B. \tag{141,4}$$

Из требования целочисленности гиперзаряда, учитывая, что для мезонов $B = 0$, приходим к старому соотношению $p - q = 3n$, т. е. эти частицы и в модели Сакаты должны заполнять унитарные синглеты, октуплеты и т. д. Для барионов же $B = 1$ и вместо (138,7) получим

$$p - q = 3n - 2, \tag{141,5}$$

т. е. барионы должны заполнять унитарные триплеты $(1,0) = 3$, секступлеты $(0,2) = \bar{6}$, 15-плеты $(2,1) = 15$ и т. д. Пользуясь

формулами (138,5) и (141,4), сразу находим значения изоспина и гиперзаряда для компонент этих мультиплетов:

| Компоненты | $Y$ | $T$ | Компоненты | $Y$ | $T$ |
|---|---|---|---|---|---|
| $\varphi_a$ | 1 | 1/2 | $\varphi_{ab}^3$ | 2 | 1 |
| $\varphi_3$ | 0 | 0 | $\varphi_{3a}^3$ | 1 | 1/2 |
| $\varphi^{33}$ | 2 | 0 | $\varphi_{ab}^c + \frac{1}{3}\left[\delta_a^c\varphi_{3b}^3 + \delta_b^c\varphi_{3a}^3\right]$ | 1 | 3/2 |
| $\varphi^{3a}$ | 1 | 1/2 | $\varphi_{33}^3$ | 0 | 0 |
| $\varphi^{ab}$ | 0 | 1 | $\varphi_{3a}^b + \frac{1}{2}\delta_a^b\varphi_{33}^3$ | 0 | 1 |
| $(a,\ b = 1,\ 2)$ | | | $\varphi_{33}^a$ | −1 | 1/2 |

Заполнение адронов по указанным мультиплетам соответствует их волновым функциям (141,1). Действительно, мезоны строятся из «сакатона» $S_i$ и антисакатона $\tilde{S}^i$, и их волновые функции преобразуются по прямому произведению $3 \otimes \overline{3}$, которое в своем разложении (137,4а) содержит как раз представления 1 и 8. Барионы строятся из двух сакатонов и одного антисакатона, а разложение (137,4в) прямого произведения $3 \otimes 3 \otimes \overline{3}$ включает именно нужные представления 3, $\overline{6}$ и 15.

Из таблицы видно, что Σ-гиперон следует поместить по крайней мере в секступлет, который включает нуклоноподобную частицу и частицу с $Y = +2$, $T = 0$, которые должны иметь спин $1/2^+$. Эти частицы до сих пор не обнаружены, хотя запретов на их существование не имеется. Ξ-гиперон должен входить в 15-плет, в котором остается большое количество незанятых мест, а Ω-гиперон вообще нельзя включить ни в один из низших мультиплетов. Таким образом, классификация адронов, основанная на модели Сакаты, гораздо менее удовлетворительна, чем в восьмеричном формализме. Кроме того, она привела к ряду выводов, прямо противоречащих эксперименту: например, в модели Сакаты запрещен наблюдавшийся процесс $\bar{p} + p \to K_L^0 + K_S^0$.

Желая сохранить все преимущества составных моделей, с одной стороны, и восьмеричного формализма, с другой, Гелл-Манн, и независимо Цвейг, в 1964 г. предложили отказаться от модификации оператора гиперзаряда (138,2) и в то же время считать, что имеется унитарный триплет

$$q_i = \begin{pmatrix} q_1 \\ q_2 \\ q_3 \end{pmatrix}, \quad \tilde{q}^i = (\tilde{q}_1,\ \tilde{q}_2,\ \tilde{q}_3) \qquad (141,6)$$

частиц, обладающих весьма непривычными свойствами. Из (138,4)—(138,6) и (138,9) следует, что они имеют такие квантовые числа (барионное число равно 1/3 по определению):

| Частица | $Q$ | $T$ | $T_3$ | $S$ | $B$ | $Y$ |
|---|---|---|---|---|---|---|
| $q_1$ | +2/3 | 1/2 | +1/2 | 0 | 1/3 | +1/3 |
| $q_2$ | −1/3 | 1/2 | −1/2 | 0 | 1/3 | +1/3 |
| $q_3$ | −1/3 | 0 | 0 | −1 | 1/3 | −2/3 |

(квантовые числа античастиц, все, кроме $T$, имеют противоположный знак), т. е. электрический заряд, барионное число и гиперзаряд этих частиц являются дробными. Этими свойствами они и обязаны своему названию — *кварки* (нечто непонятное и мистическое из одного из романов английского писателя Д. Джойса).

Мезоны строятся из одного кварка и одного антикварка и вследствие (137,4а) размещаются по унитарным синглетам и октуплетам. Если пара $q-\tilde{q}$ находится в $^1S_0$-состоянии, то ее полный спин равен нулю, а четность отрицательна, и мы получаем псевдоскалярные мезоны с волновыми функциями

$$\pi^+ = q_1\tilde{q}_2, \quad \pi^- = \tilde{q}_1 q_2, \quad \pi^0 = \frac{1}{\sqrt{2}}(q_1\tilde{q}_1 - q_2\tilde{q}_2);$$
$$K^+ = q_1\tilde{q}_3, \quad K^0 = q_2\tilde{q}_3, \quad K^- = \tilde{q}_1 q_3, \quad \tilde{K}^0 = \tilde{q}_2 q_3; \tag{141,7}$$
$$\eta = \frac{1}{\sqrt{6}}(q_1\tilde{q}_1 + q_2\tilde{q}_2 - 2q_3\tilde{q}_3); \quad X^0 = \frac{1}{\sqrt{3}}(q_1\tilde{q}_1 + q_2\tilde{q}_2 + q_3\tilde{q}_3),$$

где $X^0$ — резонанс в системе $\pi\pi\eta$ с массой 960 *Мэв* и с $T = Y = 0$, являющийся унитарным синглетом. Если пара $q-\tilde{q}$ находится в $^3S_1$-состоянии, то ее спин равен $1^-$, и мы приходим к векторным мезонам $\rho$, $K^*$, $\omega'$ и $\varphi'$, волновые функции которых строятся аналогично (141,7). Так как для кварка $B = 1/3$, то система из трех таких частиц будет иметь барионное число, равное 1, и поэтому ее естественно отождествить с барионом (напомним, что в модели Сакаты барионы строятся из двух частиц и одной античастицы). Волновая функция системы $q-q-q$ преобразуется по представлению $3 \otimes 3 \otimes 3$ и поэтому из разложения (137,4б) следует, что в модели кварков, как и в восьмеричном формализме, барионы заполняют унитарные синглеты, октуплеты и декуплеты. Если спины двух кварков параллельны, то существует девять состояний $1/2^+$, из которых одно является унитарным синглетом, а восемь остальных принадлежат унитарному октуплету. Если спины всех трех кварков

параллельны, то получаем 10 состояний $3/2^+$, образующих декуплет.

Мы не будем рассматривать динамические следствия модели кварков и некоторые присущие ей трудности, отсылая читателя к соответствующей литературе[1]). Остановимся коротко лишь на проблеме реальности существования этих необычных частиц. Если кварки действительно существуют, то их мир должен быть почти не зависимым от обычного: из дробности заряда вытекает, что самый легкий из кварков должен быть абсолютно стабильным, причем рождаться они могут только в виде пары кварк — антикварк, например, в результате бомбардировки обычной материи космическими лучами. Поэтому с течением времени общее количество кварков, содержащихся в земной коре и в водах океана должно постепенно увеличиваться. Однако многочисленные попытки найти эти «реликтовые» кварки с помощью прецезионной аппаратуры пока успехом не увенчались. Не удалось открыть их и в экспериментах на ускорителях — установлена лишь нижняя граница для их массы: $m_q > 5$ *Гэв* ($5 \cdot 10^3$ *Мэв*). Это говорит о том, что если адроны действительно построены из кварков, то их энергия связи должна быть колоссальной. В такой ситуации все большее число физиков (в том числе и сам Гелл-Манн) начинает склоняться к мысли, что если кварки и существуют, то они не могут находиться в свободном состоянии, а подобны квазичастицам, например, фононам, в твердом теле. Некоторые крупные ученые (Гейзенберг, Чью и др.) относятся к гипотезе кварков резко отрицательно.

Но, несмотря ни на что, модель кварков является весьма привлекательной и даже в самом худшем случае она является очень удобным математическим инструментом для формулировки унитарной симметрии. Ближайшее будущее должно дать ответ на один из кардинальных вопросов современной физики элементарных частиц: реальны ли кварки, и если да, то в каком смысле, или они являются чисто математической фикцией?

## § 142. Общая оценка унитарной симметрии

Из содержания предшествующих параграфов видно, что в последние годы физика элементарных частиц благодаря гипотезе о приближенной инвариантности сильного взаимодействия относительно группы $SU(3)$ весьма значительно продвинулась

---

[1]) См., например, обзор Е. М. Левина и Л. Л. Франкфурта в УФН **94**, 243 (1968) и достаточно популярный обзор Я. Б. Зельдовича в УФН **86**, 203 (1965).

вперед. Успехи унитарной симметрии многочисленны и впечатляющи.

1. Все стабильные адроны и низко лежащие резонансы размещены по унитарным мультиплетам, члены которых обладают одним и тем же спином, четностью и барионным числом: октуплет мезонов $0^-$, октуплет барионов $1/2^+$, декуплет $3/2^+$, нонуплеты мезонных резонансов $1^-$ и $2^+$ и некоторые другие. Не обнаружено ни одной частицы, которую в принципе нельзя было бы поместить в один из унитарных мультиплетов не очень высокой размерности.

2. Весьма привлекательной является модель кварков, которая позволяет построить все адроны из трех фундаментальных частиц и их античастиц.

3. Получены отличные массовые формулы для изомультиплетов, лежащих внутри одного унитарного мультиплета, которые очень хорошо согласуются с эмпирическими данными.

4. Удалось установить целый ряд соотношений между константами связи барионов с мезонами, которые в большей части еще требуют экспериментальной проверки.

5. Выведены соотношения между сечениями различных процессов; при аккуратном учете некоторых дополнительных обстоятельств ни одно из них не находится в резком несогласии с экспериментом.

6. При учете электромагнитного взаимодействия получены массовые формулы для отдельных членов изомультиплетов, входящих в унитарный мультиплет. Например, из теоретического соотношения

$$(m_n - m_p) - (m_{\Xi^0} - m_{\Xi^-}) = m_{\Sigma^-} - m_{\Sigma^+} \tag{142,1}$$

был предсказан знак разности масс $\Xi^0$- и $\Xi^-$-гиперонов. Впоследствии это предсказание было подтверждено экспериментально.

7. Выведены соотношения между магнитными моментами барионов, принадлежащих одному унитарному мультиплету. В частности, показано, что для членов октуплета $1/2^+$ имеют место равенства

$$\mu_p = \mu_{\Sigma^+}; \quad \mu_\Xi = \mu_{\Sigma^-}; \quad \mu_n = 2\mu_\Lambda = -2\mu_{\Sigma^0}. \tag{142,2}$$

8. Наконец, Каббибо в схему унитарной симметрии удалось включить и слабое взаимодействие, благодаря чему эта теория приобрела известную стройность и законченность.

Первые пять пунктов обсуждались в § 138—141, а на остальных мы не останавливаемся, отсылая читателя к литературе[1]).

[1]) См., например, монографию Нгуен Ван Хьеу, Лекции по теории унитарной симметрии элементарных частиц, Атомиздат, 1967.

С другой стороны, гипотеза унитарной симметрии обладает рядом существенных недостатков.

1. Прежде всего, теоретико-групповая схема не содержит элементов динамики, и она должна быть лишь частью некоторой будущей теории элементарных частиц.

2. Совершенно открытым остается вопрос о природе унитарной симметрии и ее нарушения. По этому поводу высказываются различные точки зрения:

а) унитарная симметрия является фундаментальным свойством сильного взаимодействия, которое присуще ему так же, как, скажем, инвариантность относительно преобразований из группы Лоренца; в этом случае она нарушается или умеренно сильным взаимодействием, константа связи которого имеет порядок 0,1 (напомним, что константа связи сильного взаимодействия равна примерно 14) или благодаря взаимодействию с вакуумным состоянием, которое может обладать сложной структурой (так называемое спонтанное нарушение симметрии);

б) унитарная симметрия является приближенной по самой своей природе, «следствием сложной игры различных факторов»[1]); в этом случае ставить вопрос о природе нарушения $SU(3)$-инвариантности не приходится, и требование, чтобы обязательно существовал унитарный триплет частиц — кварки, является бессмысленным;

в) существует строго унитарно-симметричное сверхсильное взаимодействие, а $SU(3)$-инвариантность нарушается в результате включения реального сильного взаимодействия; такая ситуация аналогична тому, что имеет место в случае изоспиновой симметрии.

3. Модель кварков в своем первоначальном варианте, описанном в § 141, содержит ряд логических трудностей. Одна из них состоит в том, что при попытке построения адронов из трех кварков пространственно-спиновая часть волновой функции оказывается антисимметричной по отношению к перестановке кварков, что является необычным для низшего состояния. При попытке преодолеть эту трудность кварку приписывалось новое квантовое число, что эививалентно рассмотрению не трех, а девяти кварков, благодаря чему стройность и изящество построения теряются. Были даже предложения считать, что кварки удовлетворяют не статистике Ферми — Дирака, а некоторой новой, так называемой парастатистике, в которой числа заполнения могут принимать, скажем, значения 0,1 и 2.

4. Унитарно-симметричная схема обладает целых рядом других, не столь принципиальных, но все же существенных недостатков, которые мы просто перечислим:

---

[1]) Дж. Чью, Аналигическая теория $S$-матриц. «Мир», 1968.

а) не вполне ясна ситуация с размещением по мультиплетам высших резонансных состояний, например, не выяснен вопрос, куда следует помещать частицу $\Lambda_{1405}$, имеющую спин $1/2^-$;

б) нет окончательного решения проблемы $\omega$ — $\varphi$-смешивания;

в) остается вопрос, почему же все-таки в массовую формулу для барионов входит сама масса, а в массовую формулу для мезонов — ее квадрат;

г) существует явное противоречие между огромной точностью массовой формулы для декуплета $3/2^+$ и плохими соотношениями для вероятностей распада этих резонансов и т. д.

Следует отметить также, что по целому ряду причин рамки группы $SU(3)$ оказываются слишком узкими:

1) она не включает барионное число;

2) параметры $\omega$ — $\varphi$-смешивания не предсказываются, а вводятся в теорию извне;

3) имеется ряд межмультиплетных соотношений, указывающих на корреляцию унитарных квантовых чисел с обычным спином; так, например, параметры, входящие в формулу Окубо (140,10) для октуплета и декуплета барионов, оказывается почти равными, имеет место массовая формула

$$m_{K^*}^2 - m_\rho^2 = m_K^2 - m_\pi^2, \text{ и т. д.}; \tag{142,3}$$

4) некоторых физиков не удовлетворяет дробность зарядов кварков, что требует исправления соотношения Гелл-Манна — Нишиджимы путем введения в него нового квантового числа, а значит, и повышения ранга основной группы симметрии.

При попытке частичного преодоления указанных недостатков была сформулирована теоретическая схема, инвариантная относительно группы $SU(6)$, которая описывает и унитарную симметрию и спиновые свойства частиц одновременно. Псевдоскалярные и векторные мезоны заполняют мультиплет размерности 35 этой группы (у каждого мезона $0^-$ одно спиновое состояние, а у мезона $1^-$ — три спиновых состояния, так что если включить еще унитарно-скалярную частицу $1^-$, то всего получим $8 \cdot 1 + 8 \cdot 3 + 1 \cdot 3 = 35$ членов мультиплета), а барионы $1/2^+$ и $3/2^+$ — 56-плет $(8 \cdot 2 + 10 \cdot 4 = 56)$. Наиболее впечатляющим результатом группы $SU(6)$ является формула для отношения магнитных моментов протона и нейтрона:

$$\mu_n/\mu_p = -2/3 \tag{142,4}$$

(при экспериментальном значении — 0,68). Но группа $SU(6)$ является существенно нерелятивистской и непригодна, например, для описания процессов рассеяния частиц. При попытке же ее релятивизации возникли неопреодолимые трудности.

Пути дальнейшего развития теории должен по-видимому подсказать эксперимент.

**Таблица стабильных элементарных частиц**

| Класс | Частица | Масса, *Мэв* | Спин и четность | Время жизни, *сек* | Основные распады | $S$ | $T$ | $T_3$ |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| Фотон $B=0$ $L=0$ | $\gamma$ | 0 | $1^-$ | $\infty$ | – | – | – | – |
| Лептоны $B=0,\ L=1$ | $\nu_e$ | 0 | 1/2 | $\infty$ | – | – | – | – |
| | $\nu_\mu$ | 0 | 1/2 | $\infty$ | – | – | – | – |
| | $e^-$ | 0,511 | 1/2 | $\infty$ | – | – | – | – |
| | $\mu^-$ | 105,66 | 1/2 | $2{,}2\cdot 10^{-6}$ | $e^-\tilde{\nu}_e\nu_\mu$ | – | – | – |
| Мезоны $B=0,\ L=0$ | $\pi^+$ | 139,58 | $0^-$ | $2{,}6\cdot 10^{-8}$ | $\mu^+\nu_\mu$ | 0 | 1 | +1 |
| | $\pi^0$ | 134,98 | | $0{,}89\cdot 10^{-16}$ | $\gamma\gamma$ | | | 0 |
| | $\pi^-$ | 139,58 | | $2{,}6\cdot 10^{-8}$ | $\mu^-\tilde{\nu}_\mu$ | | | –1 |
| | $K^+$ | 493,8 | $0^-$ | $1{,}24\cdot 10^{-8}$ | $\mu^+\nu_\mu$; $\pi^+\pi^0$; $\pi^+\pi^-\pi^+$ | +1 | 1/2 | +1/2 |
| | $K^0$: $K_s^0$ | 497,9 | | $0{,}87\cdot 10^{-10}$ | $\pi^+\pi^-$; $\pi^0\pi^0$ | | | –1/2 |
| | $K^0$: $K_L^0$ | | | $5{,}73\cdot 10^{-8}$ | $\pi e\nu_e$; $\pi\mu\nu_\mu$; $\pi^0\pi^0\pi^0$; $\pi^+\pi^-\pi^0$ | | | |
| | $\eta$ | 548 | $0^-$ | $\sim 10^{-17}$ | $\gamma\gamma$; $\pi^+\pi^-\pi^0$; $\pi^0\pi^0\pi^0$; $\pi^0\gamma\gamma$ | 0 | 0 | 0 |
| Барионы $B=1,\ L=0$ | $p$ | 938,25 | $1/2^+$ | $\infty$ | – | 0 | 1/2 | +1/2 |
| | $n$ | 939,55 | | $\sim 10^3$ | $pe^-\tilde{\nu}_e$ | | | –1/2 |
| | $\Lambda$ | 1115,6 | $1/2^+$ | $2{,}54\cdot 10^{-10}$ | $p\pi^-$; $n\pi^0$ | –1 | 0 | 0 |
| | $\Sigma^+$ | 1189,5 | $1/2^+$ | $0{,}8\cdot 10^{-10}$ | $p\pi^0$; $n\pi^+$ | –1 | 1 | +1 |
| | $\Sigma^-$ | 1192,6 | | $< 1\cdot 10^{-14}$ | $\Lambda\gamma$ | | | 0 |
| | $\Sigma^0$ | 1197,4 | | $1{,}65\cdot 10^{-10}$ | $n\pi^-$ | | | –1 |
| | $\Xi^0$ | 1314,7 | $1/2^+$? | $3\cdot 10^{-10}$ | $\Lambda\pi^0$ | –2 | 1/2 | +1/2 |
| | $\Xi^-$ | 1321,2 | | $1{,}74\cdot 10^{-10}$ | $\Lambda\pi^-$ | | | –1/2 |
| | $\Omega$ | 1674 | $3/2^+$? | $\sim 1\cdot 10^{-10}$ | $\Xi\pi$; $\Lambda\tilde{K}^+$ | –3 | 0 | 0 |

**Таблица наиболее важных резонансов**

| Класс | Частица | Масса, *Мэв* | Спин и четность | Ширина[1]), *Мэв* | Основные распады | $S$ | $T$ |
|---|---|---|---|---|---|---|---|
| Мезонные резонансы $B=0$, $L=0$ | $\omega$ | 783 | $1^-$ | 12 | $\pi^+\pi^-\pi^0$; $\pi^0\gamma$ | 0 | 0 |
| | $\varphi$ | 1019 | $1^-$ | 4 | $K^+K^-$; $K_LK_S$; $\pi^+\pi^-\pi^0$ | 0 | 0 |
| | $f$ | 1250 | $2^+$ | 110 | $\pi\pi$ | 0 | 0 |
| | $\rho^\pm$<br>$\rho^0$ | 774<br>780 | $1^-$ | 128 | $\pi\pi$ | 0 | 1 |
| | $K^*$ | 892 | $1^-$ | 50 | $K\pi$ | +1 | 1/2 |
| Барионные резонансы $B=1$, $L=0$ | $\Delta_{1236}$ | 1236 | $3/2^+$ | 120 | $N\pi$ | 0 | 3/2 |
| | $\Sigma_{1385}$ | 1382 | $3/2^+$ | 40 | $\Lambda\pi$; $\Sigma\pi$ | —1 | 1 |
| | $\Xi_{1530}$ | 1530 | $3/2^+$ | 7 | $\Xi\pi$ | −2 | 1/2 |

[1]) Время жизни $\tau$ связано с шириной $\Gamma$ соотношением неопределенности $\Delta E\ \Delta t \sim \hbar$, т. е. $\tau = \hbar/\Gamma$.

# КВАНТОВАЯ СТАТИСТИКА И ФИЗИЧЕСКАЯ КИНЕТИКА

ГЛАВА 1

## КВАНТОВАЯ СТАТИСТИКА

### § 1. Статистическая матрица и статистический оператор

В первой главе этой части будут рассмотрены некоторые вопросы статистической физики, существенно связанные с использованием представлений квантовой механики.

В квантовой механике под системой частиц мы подразумевали сравнительно ограниченное их собрание. Однако, как и в классической физике, необходимо совершить переход к системам с весьма большим числом частиц. Иначе говоря, необходимо найти способ перехода от квантовой механики к квантовой статистике.

При изложении статистической физики в ч. III с самого начала были учтены те глубокие изменения, которые вносят в нее квантовые явления. Именно, при вычислении функции состояний проводилось суммирование по уровням энергии системы; статистический вес состояний определялся на основе допущения о том, что каждому состоянию отвечает ячейка в фазовом пространстве объемом $(2\pi\hbar)^3$. Иными словами, с самого начала статистическая физика строилась в квазиклассическом приближении. Кроме того, мы видели, что тождественность квантовых частиц приводит к фундаментальному изменению свойств их статистических ансамблей.

В квантовой механике было дано обоснование квазиклассического приближения и, тем самым, до известной степени получили свое оправдание те основные положения, на которых строилось наше изложение статистической физики.

Сейчас мы перейдем к более последовательному построению квантовой статистической физики.

Рассмотрим некоторую подсистему, взаимодействующую со средой. Среда и подсистема вместе образуют замкнутую систему, поведение которой описывается волновой функцией $\Psi$. Это волновая функция зависит как от состояния частиц подсистемы, так и от состояния частиц среды. Поскольку подси-

стема взаимодействует со средой, нельзя найти волновую функцию подсистемы, которая зависела бы только от координат частиц системы, но не зависела от координат частиц среды. Поэтому незамкнутой подсистеме нельзя приписать собственную волновую функцию. Иными словами, состояния незамкнутой подсистемы образуют совокупность смешанных состояний. Часто кратко это формулируют словами «незамкнутая подсистема находится в смешанном состоянии».

Нас, как всегда в статистической физике, будут интересовать средние по времени (или по ансамблю) значения величин $L$. Чтобы не смешивать это среднее с обычным кантовомеханическим усреднением, мы будем обозначать статистическое среднее символом $\langle L\rangle$. Сопоставим величине $L$ оператор $\hat{L}$. Его квантовомеханическое среднее есть

$$\bar{L} = \int \Psi^* \hat{L} \Psi \, d\tau. \quad (1,1)$$

Здесь $\hat{L}$ и $\bar{L}$ относятся к квазизамкнутой подсистеме и зависят только от величины ее описывающих, тогда как интегрирование ведется по всей замкнутой системе.

Рассмотрим теперь нашу квазизамкнутую подсистему. Полностью отключим ее взаимодействие с внешней средой. Тогда наша подсистема из квазизамкнутой превратится в замкнутую. Гамильтониан квазизамкнутой подсистемы $\hat{H} + \hat{H}_{\text{int}}$, где $\hat{H}_{\text{int}}$ описывает ее взаимодействие со средой, перейдет в гамильтониан $\hat{H}$. Для ясности, мы будем такую малую замкнутую систему именовать замкнутой подсистемой. Очевидно, что замкнутая подсистема обладает свойствами, совершенно отличными от квазизамкнутой подсистемы. Ее состояния не зависят от состояния внешней среды и, следовательно, являются чистыми состояниями. Замкнутая подсистема может описываться некоторой волновой функцией. Если через $n$ обозначить совокупность квантовых чисел, характеризующих состояние замкнутой подсистемы, то совокупность волновых функций $\psi_n$ этой подсистемы образует полный набор ортонормированных функций. Поэтому можно написать разложение

$$\Psi = \sum c_n \psi_n. \quad (1,2)$$

Коэффициенты $c_n$ зависят от переменных, характеризующих состояние частиц внешней среды и времени. При этом, однако, их всегда можно считать удовлетворяющими условию нормировки

$$\sum |c_n|^2 = 1. \quad (1,3)$$

Подставляя разложение (1,2) в определение квантовомеханического среднего, мы получаем

$$\overline{L} = \sum_{n,\, m} c_n^* c_m \int \psi_n^* \hat{L} \psi_m \, d\tau = \sum_{n,\, m} c_n^* c_m L_{nm}. \tag{1,4}$$

Формула (1,4) дает полное квантовомеханическое описание величины $\hat{L}$. Ее неопределенность, т. е. тот факт, что $L$ может принимать любые значения и мы можем найти лишь среднее значение $\overline{L}$, связана с существом квантовомеханического описания. Если бы подсистема была замкнутой, то коэффициенты $c_n$ не зависели бы от времени и $|c_n|^2$ давало бы вероятность найти замкнутую подсистему в $n$-м состоянии. В незамкнутой подсистеме коэффициенты $c_n$ таким свойством не обладают.

Перейдем теперь к статистическому среднему для квазизамкнутой подсистемы

$$\langle L \rangle = \overline{\sum c_n^* c_m L_{nm}}^{\,t}. \tag{1,5}$$

Усреднение по времени проводится за время, большое по сравнению с микроскопическими временами.

Введем теперь матрицу, определяемую совокупностью элементов $\overline{c_n^* c_m}^{\,t}$. Элементы этой матрицы равны

$$\rho_{mn} = \overline{c_n^* c_m}^{\,t}. \tag{1,6}$$

Тогда (1,5) можно представить в виде

$$\langle L \rangle = \sum_{n,\, m} s_{mn} L_{nm}. \tag{1,7}$$

Введем, далее, оператор $\hat{\rho}$, матричные элементы которого суть $\rho_{nm}$. Матрица $\rho_{nm}$ носит название статистической матрицы или матрицы плотности, а оператор $\hat{\rho}$ — статистического оператора. Тогда, очевидно, последнюю формулу можно представить в виде

$$\langle L \rangle = \sum_n \Big( \sum_m s_{mn} L_{nm} \Big) = \sum_n (\hat{\rho} \hat{L})_{nn} = \operatorname{Sp} \hat{\rho} \hat{L}. \tag{1,8}$$

Мы видим, что для нахождения статистического среднего некоторого оператора $\hat{L}$ нужно знать матрицу плотности (или статистический оператор), заменяющую функцию распределения классической статистики.

В статистическом среднем сделан дальнейший шаг по сравнению с квантовомеханическим средним: учтено взаимодействие со средой, имеющее весьма сложный характер. Поэтому точный учет этого взаимодействия заменен усреднением по времени всей совокупности коэффициентов $c_n^* c_m \to \overline{c_n^* c_m}$. Ясно, что по

сравнению с квантовомеханическим описанием (т. е. заданием величин $\bar{L}$) статистическое описание (задание величин $\langle\bar{L}\rangle$) является неполным.

При описании системы с помощью волновой функции можно, например, указать точные возможные значения различных величин, характеризующих систему как целое, даже единственное возможное их значение. При описании с помощью статистической матрицы подобные предсказания невозможны и мы вынуждены ограничиться вычислением статистических средних. При образовании статистического среднего автоматически учтены особенности квантовомеханического описания. Ситуация здесь в точности такая же, как в классической механике и статистике. При переходе к системе с весьма большим числом частиц динамическое описание заменяется статистическим. И именно последнее адекватно физическим свойствам системы.

Мы хотели бы предостеречь от неправильного понимания статистического усреднения в квантовой механике как простой последовательности двух усреднений — квантовомеханического и статистического. Выполнение квантовомеханического усреднения согласно общей формуле требует задания волновой функции. Незамкнутая подсистема находится в смешанном состоянии и не обладает никакой волновой функцией. Усреднение в формуле (1,1) производится по существующей, но неизвестной волновой функции замкнутой системы (подсистема + среда). Ясно, что нахождение волновой функции $\Psi$ представляет задачу нереальной сложности.

Смысл формулы (1,7) заключается в том, что для нахождения статистических средних не требуется ни отыскание волновой функции $\Psi$ замкнутой системы, ни детальное описание поведения квазизамкнутой подсистемы.

Для нахождения среднего $\langle L\rangle$ нужно знать лишь матрицу плотности $\rho$ (или эквивалентный ей статистический оператор) и матричные элементы $L$. Последние вычисляются с помощью волновых функций замкнутой подсистемы и определяются только свойством последней.

Ситуация оказывается весьма сходной с классической статистикой. Для вычисления средних нужно задать функцию распределения и свойства (кратность вырождения состояний) подсистемы без учета ее взаимодействия со средой.

Подчеркнем, что до сих пор мы никак не специализировали свойства квазизамкнутой подсистемы. Она может содержать как большое, так и малое число частиц. Существенно лишь то обстоятельство, что подсистема находится в смешанном состоянии. Для любой системы, находящейся в смешанном состоянии, матрица плотности играет роль волновой функции у системы в чистом состоянии.

## § 2. Статистическое распределение в квантовой статистике

Найдем зависимость статистического оператора от времени. Для этого рассмотрим среднее значение оператора $\hat{\dot{L}}$, предполагая, что оператор $\langle\hat{L}\rangle$ не зависит от времени явно. Из (1,8) следует, что

$$\langle\hat{\dot{L}}\rangle = \mathrm{Sp}\left(\frac{\partial\hat{\rho}}{\partial t}\hat{L}\right). \tag{2,1}$$

С другой стороны, согласно (31,2) ч. V можно написать

$$\hat{\dot{L}} = \frac{i}{\hbar}[\hat{H}\hat{L}], \tag{2,2}$$

где $\hat{H}$ — оператор Гамильтона замкнутой подсистемы, к которой отнесен оператор $\hat{L}$.

Подставляя (2,2) в (1,8), получаем

$$\langle\hat{\dot{L}}\rangle = \frac{i}{\hbar}\,\mathrm{Sp}\,\hat{\rho}\,[\hat{H}\hat{L}] = \frac{i}{\hbar}\{\mathrm{Sp}(\hat{\rho}\hat{H}\hat{L}) - \mathrm{Sp}(\hat{\rho}\hat{L}\hat{H})\} =$$
$$= \frac{i}{\hbar}\{\mathrm{Sp}(\hat{\rho}\hat{H}\hat{L}) - \mathrm{Sp}(\hat{H}\hat{\rho}\hat{L})\} = \frac{i}{\hbar}\,\mathrm{Sp}\,[\hat{\rho}\hat{H}]\,\hat{L}.$$

Для того чтобы оба выражения для $\langle\hat{\dot{L}}\rangle$ совпадали, необходимо принять соотношение

$$\frac{\partial\hat{\rho}}{\partial t} = \frac{i}{\hbar}[\hat{\rho}\hat{H}] = \frac{i}{\hbar}(\hat{\rho}\hat{H} - \hat{H}\hat{\rho}). \tag{2,3}$$

Производная по времени от статистического оператора отличается знаком от производной по времени обычных операторов.

В матричном виде формулу (2,3) можно представить в виде

$$\frac{\partial\rho_{mn}}{\partial t} = \frac{i}{\hbar}\sum_k(\rho_{mk}H_{kn} - H_{mk}\rho_{kn}). \tag{2,4}$$

Формула (2,3) (или эквивалентная ей формула (2,4)) определяет эволюцию во времени системы, описываемой матрицей плотности. Она выражает один из самых общих законов природы.

Однако явный вид оператора $\hat{\rho}$ (или матрицы $\rho_{mn}$) неизвестен и не может быть определен только из уравнения (2,3) без использования дополнительных сведений о свойствах подсистемы. Мы ограничимся пока случаем стационарных состояний, когда матрица плотности не изменяется во времени. Ниже, в кинетике, будут обсуждаться законы изменения состояний во времени.

В стационарных условиях формула (2,4) дает

$$[\hat{\rho}\hat{H}] = 0$$

или

$$\sum_k (\rho_{mk}H_{kn} - H_{mk}\rho_{kn}) = 0. \tag{2,5}$$

Мы видим, что статистический оператор коммутирует с оператором Гамильтона и является интегралом движения.

Перейдем теперь к энергетическому представлению, когда базисные функции $\psi_n$ в разложении (1,2) являются собственными функциями оператора Гамильтона изолированной подсистемы

$$\hat{H}\psi_n = E_n\psi_n.$$

В этом случае отличны от нуля только диагональные матричные элементы

$$H_{kn} = E_n\delta_{kn}.$$

Из формулы (2,5) следует при этом

$$\sum_k (\rho_{mk}\delta_{kn}E_n - \rho_{kn}\delta_{km}E_m) = 0. \tag{2,6}$$

Последнее соотношение показывает, что могут быть отличными от нуля только диагональные элементы статистической матрицы. Если вернуться к определению (1,6), то это означает, что

$$\overline{c_n^*c_m} = \delta_{nm}\overline{|c_n|^2}. \tag{2,7}$$

Последнее равенство еще раз подчеркивает особенности описания с помощью статистической матрицы. Имеющееся взаимодействие всегда приводит подсистему в смешанное состояние и нарушает интерференцию между состояниями, характерную для систем в чистом состоянии.

Часто соотношение (2,7) именуют условием случайных фаз. Действительно, если коэффициенты $c_n$, $c_m$ зависят от времени, то фазы отдельных коэффициентов совершенно не коррелированы. Усреднение их дает (2,7).

Удобно обозначить отличные от нуля диагональные элементы статистической матрицы как

$$\rho_{nn} = \overline{c_n^*c_n} = w_n. \tag{2,8}$$

При этом формула для статистического среднего приобретает знакомый вид

$$\langle\hat{L}\rangle = \sum_n w_nL_{nn}. \tag{2,9}$$

Формула (2,9) показывает, что величины $w_n$ представляют распределение вероятностей того, что рассматриваемая подсистема попадает в $n$-е энергетическое состояние.

Нашей дальнейшей задачей является нахождение распределения вероятностей $w_n$.

Рассмотрим прежде всего случай замкнутой системы. В квантовой механике не существует замкнутых систем в прямом смысле этого слова. Всякая реальная система, состоящая из атомов, испытывает взаимодействие с окружающим миром. Это может быть, например, взаимодействие с электромагнитным полем. Более того, в § 34 ч. V мы видели, что полная энергия замкнутой системы не может иметь определенного, постоянного во времени значения. Поэтому состояния замкнутой системы, содержащей большое число частиц, можно считать смешанными. Имеющиеся взаимодействия, не изменяющие существенно энергии системы, приводят к нарушению интерференции между состояниями и случайному распределению фаз. Энергию замкнутой системы можно считать заключенной в интервал $\delta\varepsilon_i \ll \varepsilon_i$, но постоянно изменяющейся в этом интервале.

Гипотеза о том, что макроскопическая система находится в смешанном состоянии, лежит в основе статистической физики. Однако для нахождения явного вида $w_n$ необходимо высказать вторую гипотезу. Именно, следует принять, что все состояния замкнутой системы являются равновероятными. Отсюда следует, что $w_n$ можно представить в виде микроканонического распределения

$$w_n = \Omega(\varepsilon_i). \qquad (2,10)$$

Мы не будем повторять здесь рассуждений § 15 и 16 ч. III, где достаточно подробно обсуждалась гипотеза о равных вероятностях состояний замкнутой системы. Вывод канонического распределения из микроканонического, данный в § 16 ч. III, имеет вполне общий характер.

В этом выводе предполагалось лишь, что квазизамкнутая подсистема является малой частью замкнутой системы, описывающейся микроканоническим распределением. Дискретный характер энергетических условий был уже учтен в приведенном в ч. III выражении для канонического распределения.

В квантовой статистике удобнее представить нормированное каноническое распределение в виде

$$w_n = \frac{e^{-\frac{\varepsilon_n}{kT}}}{\sum e^{-\frac{\varepsilon_n}{kT}}} = \frac{e^{-\frac{\varepsilon_n}{kT}}}{Z}, \qquad (2,11)$$

где суммирование ведется по всем состояниям. Функция состояний (статистическая сумма) имеет вид

$$Z = \sum w_n = \sum \rho_{nn} = \sum e^{-\frac{\varepsilon_n}{kT}}. \qquad (2,12)$$

Каждое вырожденное состояние вносит в $Z$ число слагаемых, равное кратности вырождения. Для статистического оператора, отвечающего распределению вероятностей (2,11), получаем выражение

$$\hat{\rho} = \frac{1}{Z} e^{-\frac{\hat{H}}{kT}}. \tag{2,13}$$

Действительно, если $\psi_n$ — собственная функция оператора $\hat{H}$, то можно написать равенство

$$\hat{\rho}\psi_n = \frac{1}{Z} e^{-\frac{\hat{H}}{kT}} \psi_n = \frac{1}{Z}\left(1 - \frac{\hat{H}}{kT} + \frac{\hat{H}^2}{2(kT)^2} - \ldots\right)\psi_n =$$

$$= \frac{1}{Z}\left(1 - \frac{\varepsilon_n}{kT} + \frac{\varepsilon_n^2}{2(kT)^2} - \ldots\right)\psi_n = \frac{e^{-\frac{\varepsilon_n}{kT}}}{Z}\psi_n = w_n\psi_n. \tag{2,14}$$

Средние значения и функция состояний (статистическая сумма) с помощью оператора $\hat{\rho}$ могут быть представлены как

$$\langle\hat{L}\rangle = \frac{\mathrm{Sp}\, \hat{L} e^{-\frac{\hat{H}}{kT}}}{\mathrm{Sp}\, e^{-\frac{\hat{H}}{kT}}} \tag{2,15}$$

и

$$Z = \mathrm{Sp}\, e^{-\frac{\hat{H}}{kT}}. \tag{2,16}$$

При вычислении шпура суммирование ведется по всем состояниям подсистемы.

Заметим, что операторная форма записи (2,13)—(2,15) не зависит от выбора представления.

Точно так же, не повторяя вывода § 59 ч. III, можно рассмотреть системы с переменным числом частиц.

Статистический оператор в большом каноническом распределении имеет вид

$$\hat{\rho} = \frac{e^{\frac{\mu\hat{n} - \hat{H}}{kT}}}{\mathrm{Sp}\, e^{\frac{\mu\hat{n} - \hat{H}}{kT}}}, \tag{2,17}$$

где $\hat{n}$ — оператор числа частиц и $\mu$ — парциальный потенциал.

Большая статистическая сумма

$$\tilde{Z} = \mathrm{Sp}\, e^{\frac{\mu\hat{n} - \hat{H}}{kT}} \tag{2,18}$$

или, в матричной форме,

$$w_{n,\varepsilon_i} = \frac{1}{\tilde{Z}} e^{\frac{\mu n - \varepsilon_i}{kT}}, \tag{2,19}$$

$$\tilde{Z}(V, T, \mu) = \sum_{n,i} e^{\frac{\mu n - \varepsilon_i}{kT}} = \sum_n z^n Z_n, \tag{2,20}$$

где $n$ — числа заполнения, а $z$ — активность (ср. § 59 ч. III), $Z_n$ — функция состояний (2,12) для подсистемы из $n$ частиц, т. е.

$$z = e^{\frac{\mu}{kT}}; \qquad Z_n = \sum_i e^{-\frac{\varepsilon_i}{kT}}.$$

С помощью большого канонического распределения могут быть найдены средние значения по формуле (1,8). В частности, среднее значение числа частиц в подсистеме

$$\langle N \rangle = \mathrm{Sp}\,\hat{\rho}\hat{n} = \frac{\mathrm{Sp}\left(e^{\frac{\mu\hat{n} - \hat{H}}{kT}}\hat{n}\right)}{\mathrm{Sp}\,e^{\frac{\mu\hat{n} - \hat{H}}{kT}}} = kT\frac{\partial}{\partial\mu}\ln\tilde{Z}. \tag{2,21}$$

Уравнение состояния согласно (59,14) ч. III имеет вид

$$pV = kT\ln\tilde{Z}. \tag{2,22}$$

Мы рассмотрим сначала случай идеального газа, заключенного в сосуде $V$.

В идеальном газе оператор $\hat{H}$ сводится к оператору кинетической энергии

$$\hat{H} = \hat{H}_0 = \sum \frac{\hat{p}^2}{2m}. \tag{2,23}$$

Соответственно, нормированные волновые функции свободных частиц имеют вид

$$\psi_p(\boldsymbol{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{\frac{i\boldsymbol{pr}}{\hbar}}. \tag{2,24}$$

Импульсы частиц в большом объеме можно считать изменяющимися практически непрерывно.

Полная симметризованная волновая функция газа (ср. (65,6') ч. V) дается общей формулой

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_p (\mp 1)^p \, |\psi_{p_1}(\boldsymbol{r}) \ldots \psi_{p_N}(\boldsymbol{r})|. \tag{2,25}$$

Очевидно, что $\Psi$ является собственной функцией оператора $H_0$, т. е.

$$\hat{H}_0 \Psi = E\Psi, \tag{2,26}$$

где $E$ — энергия всего газа.

Суммирование ведется по всем перестановкам, знак (+) относится к бозе- и знак (—) к ферми-частицам.

Статистическая сумма согласно (2,15) и (2,23) приобретает вид

$$Z = \operatorname{Sp} e^{-\frac{\hat{H}_0}{kT}} = \sum \Psi^* e^{-\frac{\hat{H}_0}{kT}} \Psi. \tag{2,27}$$

Поскольку $\Psi$ является собственной функцией оператора $\hat{H}_0$, можно написать, аналогично (2,14),

$$e^{-\frac{\hat{H}_0}{kT}} \Psi = e^{-\frac{E}{kT}} \Psi. \tag{2,28}$$

Так что

$$Z = \sum e^{-\frac{E}{kT}} |\Psi|^2. \tag{2,29}$$

Суммирование ведется по всем состояниям, т. е. по всем возможным значениям импульсов частиц газа. Поскольку импульсы изменяются практически непрерывно, суммирование можно заменить интегрированием, написав

$$Z = \int e^{-\frac{E}{kT}} |\Psi|^2 \frac{d\Gamma}{(2\pi\hbar)^{3N}} = \\ = \frac{V^N}{(2\pi\hbar)^{3N}} \int e^{-\frac{E}{kT}} |\Psi|^2 \, dp_1 \ldots dp_{3N} d\Gamma_V = \\ = \frac{V^N}{(2\pi\hbar)^{3N}} \int e^{-\sum \frac{p^2}{2mkT}} |\Psi|^2 \, d\Gamma_{\boldsymbol{p}}. \tag{2,30}$$

Для вычисления интеграла проще всего написать $\Psi$ для системы из двух частиц. Обобщение на $N$ частиц можно получить без труда.

Итак, вычислим вспомогательный интеграл:

$$I_2=\frac{1}{2}\int e^{-\frac{p_1^2+p_2^2}{2mkT}}\,|\psi_{p_1}(\boldsymbol{r}_1)\psi_{p_2}(\boldsymbol{r}_2)\mp\psi_{p_2}(\boldsymbol{r}_1)\psi_{p_1}(\boldsymbol{r}_2)|^2\,d\boldsymbol{p}_1\,d\boldsymbol{p}_2=$$

$$=\frac{1}{2V^2}\int e^{-\frac{p_1^2+p_2^2}{2mkT}}\left|e^{\frac{i(\boldsymbol{p}_1\boldsymbol{r}_1+\boldsymbol{p}_2\boldsymbol{r}_2)}{\hbar}}\mp e^{\frac{i(\boldsymbol{p}_2\boldsymbol{r}_1+\boldsymbol{p}_1\boldsymbol{r}_2)}{\hbar}}\right|^2 d\boldsymbol{p}_1\,d\boldsymbol{p}_2=$$

$$=\frac{1}{2V^2}\int e^{-\frac{p_1^2+p_2^2}{2mkT}}\left(2\mp e^{\frac{i\boldsymbol{p}_1(\boldsymbol{r}_2-\boldsymbol{r}_1)}{\hbar}}e^{-\frac{i\boldsymbol{p}_2(\boldsymbol{r}_2-\boldsymbol{r}_1)}{\hbar}}\mp e^{-\frac{i\boldsymbol{p}_1(\boldsymbol{r}_2-\boldsymbol{r}_1)}{\hbar}}e^{\frac{i\boldsymbol{p}_2(\boldsymbol{r}_2-\boldsymbol{r}_1)}{\hbar}}\right)d\boldsymbol{p}_1\,d\boldsymbol{p}_2=$$

$$=\frac{1}{2V^2}\left[2(2\pi mkT)^3\mp\int e^{-\frac{p_1^2}{2mkT}}e^{\frac{i\boldsymbol{p}_1(\boldsymbol{r}_2-\boldsymbol{r}_1)}{\hbar}}\,d\boldsymbol{p}_1\times\right.$$

$$\times\int e^{-\frac{p_2^2}{2mkT}}e^{-\frac{i\boldsymbol{p}_2(\boldsymbol{r}_2-\boldsymbol{r}_1)}{\hbar}}\,d\boldsymbol{p}_2\mp\int e^{-\frac{p_1^2}{2mkT}}e^{-\frac{i\boldsymbol{p}_1(\boldsymbol{r}_2-\boldsymbol{r}_1)}{\hbar}}\,d\boldsymbol{p}_1\times$$

$$\left.\times\int e^{-\frac{p_2^2}{2mkT}}e^{\frac{i\boldsymbol{p}_2(\boldsymbol{r}_2-\boldsymbol{r}_1)}{\hbar}}\,d\boldsymbol{p}_2\right]=\frac{1}{V^2}(2\pi mkT)^3\left[1\mp e^{-\frac{mkT\,|\boldsymbol{r}_2-\boldsymbol{r}_1|^2}{2\hbar^2}}\right]=$$

$$=\frac{(2\pi mkT)^3}{V^2}\left[1\mp e^{-\frac{2\pi r_{12}^2}{\lambda_T^2}}\right],\qquad(2,31)$$

где $\lambda_T=\sqrt{\dfrac{2\pi\hbar^2}{mkT}}$ — длина волны частицы с энергией («тепловая длина волны» частицы с массой $m$) и $r_{12}=|\boldsymbol{r}_2-\boldsymbol{r}_1|$.

Если обозначить через $f_{ik}$ выражение

$$f_{ik}=e^{-\frac{\pi(r_{ik})^2}{\lambda_T^2}},\qquad(2,32)$$

то (2,31) можно представить в виде

$$I_2=\frac{(2\pi mkT)^3}{V^2}[1\pm f_{12}f_{21}].\qquad(2,33)$$

По аналогии с (2,31), пользуясь (2,32) и подставляя в (2,29) значение $\Psi$ из (2,25), легко написать общее выражение для функции состояний:

$$Z_1=\frac{1}{N!}\left(\frac{2\pi mkT}{(2\pi\hbar)^2}\right)^{\frac{3N}{2}}\int\left[1\pm\sum_{i<k}f_{ik}^2+\sum f_{ik}f_{kl}f_{lm}\pm\ldots\right]d\Gamma_V=$$

$$=\frac{1}{N!}\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3N}}\int e^{-\frac{E}{kT}}\,d\Gamma_p\int\left[1+\sum f_{ik}^2+\sum f_{ik}f_{kl}f_{lm}\pm\ldots\right]d\Gamma_V.\qquad(2,34)$$

Интегрирование ведется по координатам всех частиц. Мы видим прежде всего, что выражение для функции состояний идеального газа не сводится к квазиклассическому выражению

$$Z_{\text{кв. кл}} \approx \frac{1}{N!\,(2\pi\hbar)^{3N}} \int e^{-\frac{E}{kT}}\, d\Gamma_p\, d\Gamma_V, \tag{2,35}$$

которым мы пользовались в ч. III.

Если, однако, плотность газа так мала, что имеет место неравенство

$$\lambda_T \ll \bar{r}, \tag{2,36}$$

то из (2,32) видно, что величины $f_{ik}$ оказываются весьма малыми по сравнению с единицей.

Пренебрегая величинами $f_{ik}$ в (2,34), мы приходим к равенству

$$Z \simeq Z_{\text{кв. кл}}. \tag{2,37}$$

Нетрудно видеть, что для атомных или молекулярных газов неравенство (2,36) является гораздо более мягким, чем условие пренебрежения взаимодействием между частицами.

Таким образом, в не слишком плотных атомных газах всегда можно пренебречь квантовыми поправками. В плотных газах эти поправки малы по сравнению с поправками на неидеальность газа.

Тем не менее характер квантовых поправок к квазиклассическому выражению для функции состояние имеет большой принципиальный интерес.

Считая величины $f_{ik}$ малыми, мы можем, очевидно, написать

$$1 \pm \sum_{i<k} f_{ik}^2 \simeq \prod_{i<k} \left(1 \pm f_{ik}^2\right) = e^{-\frac{U(r_{ik},\,T)}{kT}}. \tag{2,38}$$

По определению

$$U(r_{ik}, T) = -kT \ln\left(1 \pm f_{ik}^2\right) = -kT \ln\left[1 \pm e^{-\frac{2\pi |r_i - r_k|^2}{\lambda_T^2}}\right]. \tag{2,39}$$

Подставляя выражение (2,38) в функцию состояний, находим

$$Z = \frac{1}{N!\,(2\pi\hbar)^{3N}} \int e^{-\frac{E}{kT}}\, d\Gamma_p \int e^{-\frac{U(r_{ik},\,T)}{kT}}\, d\Gamma_V. \tag{2,40}$$

Мы видим, что квантовая поправка сводится в нашем приближении к появлению эффективного взаимодействия между частицами. Это взаимодействие характеризуется потенциальной энергией $U(r_{ik}, T)$, зависящей от расстояния между парами частиц $i$ и $k$, а также от температуры. Последнее обстоятельство сразу показывает, что функцию $U(r_{ik}, T)$ можно рассматривать

лишь как эффективную, но не истинную потенциальную энергию.

Необходимо далее подчеркнуть, что эффективное взаимодействие является чисто квантовым эффектом, исчезающим при $\hbar \to 0$. Существование эффективного взаимодействия обсуждалось нами в § 67 части V. Это эффективное взаимодействие не связано с появлением новых сил, но обусловлено исключительно симметрией волновой функции. В случае бозе-частиц $U(r_{ik}, T)$ отрицательно при всех значениях $r_{ik}$, т. е. эффективное взаимодействие имеет характер притяжения. У ферми-частиц эффективное взаимодействие представляет отталкивание, в соответствии со сказанным в § 67 ч. V.

Обратимся теперь к обсуждению условия (2,36).

Если подставить в него значение тепловой длины волны $\lambda_T$, мы можем переписать его в виде

$$\frac{(2\pi\hbar)}{\sqrt{2\pi mkT}} \ll \left(\frac{V}{N}\right)^{1/3}. \qquad (2,36')$$

Сравнивая это с формулой (72,16) ч. III, мы видим, что условие (2,36) представляет не что иное, как условие того, что идеальный газ можно считать невырожденным. Таким образом, критерию вырождения можно придать наглядный смысл: идеальный газ можно считать невырожденным, если тепловая длина волны частиц мала по сравнению со средним расстоянием между ними. Выполнение обратного условия соответствует сильному вырождению. В этом случае величины $f_{ik}$ оказываются порядка единицы и квантовые эффекты имеют уже не характер поправок, но приобретают основное значение. В частности, эффективное квантовое взаимодействие между частицами в значительной мере определяет свойства системы как целого. Это мы видели в ч. III на примере вырожденного ферми-газа. Во избежание недоразумений подчеркнем, что при этом формулой (2,39) пользоваться уже нельзя, поскольку она была получена на основе неравенства (2,36). Можно показать, что аналогичная ситуация имеет место в системах взаимодействующих частиц [1]). Однако критерий применимости соотношения (2,36), т. е. критерий применимости квазиклассического приближения в статистической физике, имеет вид

$$\lambda_T \ll d, \qquad (2,41)$$

где $d$ — некоторое эффективное расстояние взаимодействия между частицами. Этот критерий выполняется в газах и в конденсированных системах, построенных из атомных и молекулярных частиц (за исключением жидкого гелия II, см. ниже).

---

[1]) К. Хуанг, Статистическая механика, «Мир», 1966.

## § 3. Статистическое распределение в идеальном газе

В части III мы получили уже статистические распределения в идеальном газе. Для дальнейшего, однако, нам понадобится несколько другой их вывод, основанный на большом каноническом распределении. В случае идеального газа для большой статистической суммы можно написать

$$\tilde{Z}(V, T, z)=\sum_{n=0}^{\infty} z^n Z_n=\sum_{n=0}^{\infty} z^n \sum_{n_k} e^{-\frac{\Sigma \varepsilon_k n_k}{kT}}=\sum_{n=0}^{\infty}\sum_{n_k}\prod\left(ze^{-\frac{\varepsilon_k}{kT}}\right)^{n_k},$$

поскольку в идеальном газе энергия системы $\varepsilon$ равна

$$\varepsilon=\sum \varepsilon_k n_k,$$

где $n_k$ — число частиц в $k$-м состоянии. Очевидно, что число частиц $n_k$ подчиняется условию

$$n=\sum n_k.$$

Двойное суммирование — по числу частиц в системе и по числу частиц в данном состоянии $n_k$ — эквивалентно однократному суммированию по всем независимым значениям $n_k$. Проще всего это видно на примере частиц ферми-газа, для которых $n_k=0,1$. Имеем, очевидно, в этом случае

$$\tilde{Z}(V, T, z)=\sum_{n=0}^{1} z^n \sum_{n_k}\prod_{i}\left(e^{-\frac{\varepsilon_k}{kT}}\right)^{n_k}=\prod_{i}\sum_{n_k=0}^{1}\left(z\cdot e^{-\frac{\varepsilon_k}{kT}}\right)^{n_k}=$$

$$=\prod_{i}\left(1+ze^{-\frac{\varepsilon_k}{kT}}\right)=\prod_{i}\left(1+e^{\frac{\mu-\varepsilon_k}{kT}}\right). \quad (3,1)$$

Аналогично, для бозе-частиц

$$\tilde{Z}(V, T, z)=\sum_{n_1}\sum_{n_2}\ldots\prod_{i}\left(ze^{-\frac{\varepsilon_1}{kT}}\right)^{n_1}\left(ze^{-\frac{\varepsilon_2}{kT}}\right)^{n_2}\ldots=$$

$$=\prod_{i}\sum_{n_1}\left(ze^{-\frac{\varepsilon_1}{kT}}\right)^{n_1}\sum_{n_2}\left(ze^{-\frac{\varepsilon_2}{kT}}\right)^{n_2}\ldots=$$

$$=\prod_{i}\frac{1}{1-ze^{-\frac{\varepsilon_i}{kT}}}=\prod_{i}\frac{1}{1-e^{\frac{\mu-\varepsilon_i}{kT}}}. \quad (3,2)$$

В случае ферми-газа

$$\sum_{n_k}\left(e^{\frac{\mu-\varepsilon_k}{kT}}\right)^{n_k}=1+e^{\frac{\mu-\varepsilon_k}{kT}}.$$

В бозе-газе $n_k = 0, 1, 2, \ldots, N$, так что

$$\sum_{n_k}\left(e^{\frac{\mu-\varepsilon_k}{kT}}\right)^{n_k} = 1 - e^{\frac{\mu-\varepsilon_k}{kT}}.$$

Большую статистическую сумму (или ее логарифм, который фактически требуется для вычислений) можно записать в симметричном виде

$$\ln\tilde{Z} = \pm\sum_k \ln\left(1 \pm e^{\frac{\mu-\varepsilon_k}{kT}}\right), \quad \text{где} \begin{cases} + \text{для ферми-}, \\ - \text{для бозе-}. \end{cases} \tag{3,3}$$

Все средние могут быть выражены через большую статистическую сумму $\tilde{Z}$. Последняя зависит от переменных $\mu$, $V$ и $T$. Вместо парциального потенциала всегда можно ввести полное число частиц. Действительно, средние числа заполнения даются формулой (2,22)

$$\bar{n}_k = kT\frac{\partial \ln\tilde{Z}}{\partial\mu} = \frac{1}{e^{\frac{\varepsilon_k-\mu}{kT}} \pm 1}, \quad \text{где} \begin{cases} + \text{для ферми-}, \\ - \text{для бозе-}. \end{cases} \tag{3,4}$$

Парциальный потенциал $\mu$ определен соотношением

$$N = \sum \bar{n}_k = \sum \frac{1}{e^{\frac{\varepsilon_k-\mu}{kT}} \pm 1}, \tag{3,5}$$

позволяющей, в принципе, найти зависимость $\mu$ от $T$, $V$ и $N$.

В случае бозе-газа условие (3,5) требует, чтобы парциальный потенциал $\mu$ был отрицательным. Для газа Ферми никаких ограничений на значение $\mu$ не существует.

Наиболее наглядной термодинамической характеристикой является уравнение состояния газа. Согласно § 59 гл. III уравнение состояния газа можно выразить через $\tilde{Z}$ в виде

$$pV = \mp kT\sum_k \ln\left(1 \mp e^{\frac{\mu-\varepsilon_k}{kT}}\right), \quad \text{где} \begin{cases} + \text{для ферми-}, \\ - \text{для бозе-}. \end{cases} \tag{3,6}$$

Мы выписали все соотношения без обсуждения, поскольку это обсуждение было сделано в ч. III. Напомним лишь, что при фактическом использовании приведенных соотношений в макроскопическом газе можно перейти от суммирования к интегрированию, написав

$$\sum_k \to g\int\frac{d\Gamma}{(2\pi\hbar)^3}; \qquad \varepsilon_k = \frac{\hbar^2k^2}{2m},$$

где $g = (2s+1)$, $s$ — спин частиц. Переход к больцмановской статистике отвечает выполнению условия

$$e^{\mu/kT} \ll 1. \tag{3,7}$$

Подставляя в (3,7) парциальный потенциал идеального газа, можно представить (3,7) в виде (2,36′) или в виде (72,16) ч. III.

В части III мы подробно остановились на поведении идеального ферми-газа при низких температурах. Сейчас, во избежание повторений, мы рассмотрим только некоторые общие вопросы.

Написав (3,6) в виде

$$pV = \pm \frac{gVkT \cdot 4\pi}{(2\pi\hbar)^3} \int p^2\, dp \ln\left(1 \pm e^{\frac{\mu-\varepsilon}{kT}}\right) =$$

$$= \pm (gkT)\, 2\pi \left(\frac{2m}{(2\pi\hbar)^2}\right)^{3/2} V \int\limits_0^\infty \sqrt{\varepsilon}\, d\varepsilon \ln\left(1 \pm e^{\frac{\mu-\varepsilon}{kT}}\right) =$$

$$= \pm\, gkTV \frac{4\pi (2m)^{3/2}}{3\,(2\pi\hbar)^3} \int\limits_0^\infty \frac{\varepsilon^{3/2}\, d\varepsilon}{e^{\frac{\varepsilon-\mu}{kT}} \pm 1} = \frac{2}{3} E, \qquad (3,8)$$

мы видим, что между давлением и энергией в ферми- и бозе-газе имеет место такая же связь, как и в классическом идеальном газе.

При высоких температурах, когда выполнено условие (3,7), можно разложить подынтегральное выражение в ряд и написать так:

$$pV \simeq g \frac{(\pi m)^{3/2} V (kT)^{5/2}}{(2\pi\hbar)^3} e^{\frac{\mu}{kT}} \int\limits_0^\infty \left(1 \mp e^{\frac{\mu-\varepsilon}{kT}}\right) \times$$

$$\times e^{-\frac{\varepsilon}{kT}} \varepsilon^{3/2}\, d\varepsilon = \frac{g\,(\pi m)^{3/2} V (kT)^{5/2}}{(2\pi\hbar)^3} e^{\frac{\mu}{kT}} \left(1 \pm \frac{1}{4\sqrt{2}} e^{\frac{\mu}{kT}}\right). \qquad (3,9)$$

В последней формуле парциальный потенциал $\mu$ относится к больцмановскому газу [см. (60,9) ч. III]. Поэтому (3,9) можно переписать в виде

$$pV = NkT\left(1 \pm \frac{\pi^{3/2}}{2g} \frac{N}{V} \frac{\hbar^3}{(mkT)^{3/2}}\right), \qquad (3,10)$$

где знак минус относится к ферми- и знак плюс к бозе-газу.

Найденные поправки к давлению, как было уже подчеркнуто выше, малы по сравнению с поправками, связанными с взаимодействием между частицами.

В случае ферми-частиц, как мы видели в ч. III, эффект отталкивания, связанный с проявлением прицbackground запрета, приобретает определяющее значение в вырожденном газе.

В следующем параграфе мы обсудим проявление эффекта притяжения в вырожденном бозе-газе.

## § 4. Вырожденный идеальный бозе-газ *)

Свойства вырожденного бозе-газа коренным образом отличаются от свойств ферми-газа. Это различие связано с отсутствием каких-либо ограничений на накопление частиц в состоянии с нулевой энергией в бозе-газе.

Среднее число частиц в состоянии с нулевой энергией согласно (3,4) можно написать в виде

$$\overline{n(0)}=\frac{1}{e^{-\frac{\mu}{kT}}-1}. \tag{4,1}$$

Мы видим, что значение $\overline{n(0)}$ определяется ходом $\mu(T)$ при $T\to 0$. Как мы видели в предыдущем параграфе, парциальный потенциал в бозе-газе всегда меньше нуля. При высоких температурах он убывает по абсолютной величине с понижением температуры.

Парциальный потенциал определяется формулой (3,5) для полного числа частиц. Эту формулу можно представить в виде

$$N=\overline{n(0)}+N'=\frac{\Omega(0)}{e^{-\frac{\mu}{kT}}-1}+\sum{}'\frac{\Omega(\varepsilon_i)}{e^{\frac{\varepsilon_i-\mu}{kT}}-1}=$$
$$=\frac{1}{e^{-\frac{\mu}{kT}}-1}+\sum{}'\frac{\Omega(\varepsilon_i)}{e^{\frac{\varepsilon_i-\mu}{kT}}-1}. \tag{4,2}$$

Первый член представляет среднее число частиц в состоянии с нулевой энергией, второй — число частиц во всех остальных состояниях. Статистический вес состояния с нулевой энергией равен единице (см. § 35 ч. III).

Второе слагаемое можно представить в виде

$$N'=I(\mu,\ V,\ T)=\int_0^\infty\frac{d\Gamma}{(2\pi\hbar)^3}\frac{1}{e^{\frac{\varepsilon-\mu}{kT}}-1}. \tag{4,3}$$

Поэтому число частиц в состоянии с нулевой энергией

$$\overline{n(0)}=N-I(\mu,\ V,\ T).$$

Формула (4,2) позволяет выразить парциальный потенциал через температуру и плотность, тогда как формула (4,3) связывает число частиц в состоянии с нулевой энергией и в вырожденных состояниях с $\varepsilon\neq 0$ с полным числом частиц.

---

*) Мы следуем изложению в книге К. Хуанга «Статистическая механика», Мир, 1966, где читатель может найти ряд дополнительных сведений.

Мы видим прежде всего, что если значение интеграла $I$ в правой части ограничено некоторой величиной $N_{max}$, то число частиц в состоянии с нулевой энергией

$$\overline{n(0)} = N - N_{max} > 0$$

оказывается конечным и составляющим некоторую долю от полного числа частиц. Рассмотрим величину $I(\mu, V, T)$. Очевидно, что ее можно написать в таком виде:

$$I(\mu, V, T) = V\frac{(2\pi m)^{3/2}}{(2\pi\hbar)^3}\frac{2}{\sqrt{\pi}}\int_0^\infty \frac{\varepsilon^{1/2}\,d\varepsilon}{e^{\frac{\varepsilon-\mu}{kT}} - 1} =$$

$$= V\frac{(2\pi m)^{3/2}}{(2\pi\hbar)^3}\frac{2}{\sqrt{\pi}}\int_0^\infty \varepsilon^{1/2}\,d\varepsilon\sum_{l=1}^\infty e^{\frac{l\mu}{kT}}e^{-\frac{l\varepsilon}{kT}} =$$

$$= V\frac{(2\pi m)^{3/2}}{(2\pi\hbar)^3}\frac{2}{\sqrt{\pi}}\sum_{l=1}^\infty e^{\frac{l\mu}{kT}}\int_0^\infty e^{-\frac{l\varepsilon}{kT}}\varepsilon^{1/2}\,d\varepsilon =$$

$$= V\frac{(2\pi m)^{3/2}}{(2\pi\hbar)^3}(kT)^{3/2}\sum_{l=1}^\infty \frac{e^{\frac{l\mu}{kT}}}{l^{3/2}} = V\frac{(2\pi mkT)^{3/2}}{(2\pi\hbar)^3}F\left(-\frac{\mu}{kT}\right). \quad (4,4)$$

Таким образом, значение $I$ определяется в основном суммой

$$F\left(-\frac{\mu}{kT}\right) = \sum_{l=1}^\infty \frac{e^{\frac{l\mu}{kT}}}{l^{3/2}}. \quad (4,5)$$

Эта сумма сходится при всех значениях $\mu \leqslant 0$. Значение $F\left(-\frac{\mu}{kT}\right)$ представляет монотонно убывающую функцию своего аргумента, причем

$$F\left(-\frac{\mu}{kT}\right) \leqslant F(0) = \sum_{l=1}^\infty \frac{1}{l^{3/2}} \cong 2{,}61.$$

Соответственно,

$$I(\mu, V, T) \leqslant N'_{max} = \frac{2{,}61V(2\pi mkT)^{3/2}}{(2\pi\hbar)^3}. \quad (4,6)$$

Поэтому

$$\overline{n(0)} \geqslant N - \frac{2{,}61V(2\pi mkT)^{3/2}}{(2\pi\hbar)^3}. \quad (4,7)$$

Если имеет место равенство

$$N = N'_{max} = 2{,}61\frac{V(2\pi mkT)^{3/2}}{(2\pi\hbar)^3}, \quad (4,8)$$

или

$$kT_0 = \frac{1}{(2{,}61)^{2/3}} \frac{(2\pi\hbar)^2}{(2\pi m)} \left(\frac{N}{V}\right)^{2/3}, \tag{4,9}$$

то $\overline{n(0)} = 0$.

При $T > T_0$ в состоянии с нулевой энергией нет частиц. Точнее говоря, число частиц в этом состоянии $\overline{n(0)} \sim 1$ и пренебрежимо мало́ по сравнению с числом частиц, находящихся в возбужденных состояниях $(N' \sim N)$. При достижении температуры более низкой, чем $T_0$, в состоянии с нулевой энергией возникает конечное число частиц $\overline{n(0)}$, составляющее некоторую долю от полного числа частиц. Распределение частиц по состояниям приобретает качественно новый вид: конечное число частиц находится на одном (нулевом) уровне энергии, а остальные частицы практически непрерывно распределены по всем возбужденным состояниям. Это явление получило название конденсации Бозе — Эйнштейна, а температура $T_0$ — температуры конденсации.

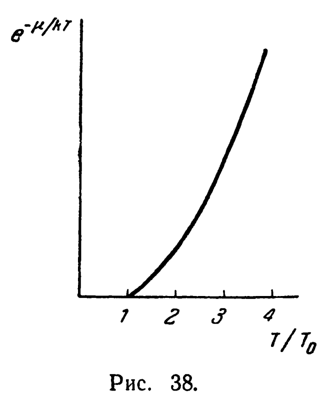


Рис. 38.

Явная зависимость $\overline{n(0)}$ от $T$ и $N/V$ может быть найдена, если установлена зависимость от этих величин парциального потенциала. Последняя, как мы видели, определяется уравнением (4,2). Его решение (например, графическое), показывает, что при $T = T_0$, парциальный потенциал обращается в нуль. Кривая зависимости $(-\mu/kT) = f(T/T_0)$ приведена на рис. 38.

При температурах, лежащих ниже температуры конденсации $T_0$, в уравнении (4,2) можно положить $\mu$ равными нулю. Тогда находим

$$\overline{n(0)} = N - I(\mu = 0,\ T,\ V) = N - N' =$$
$$= N - \frac{2{,}61 V (2\pi mkT)^{3/2}}{(2\pi\hbar)^3} = N\left(1 - \left(\frac{T}{T_0}\right)^{3/2}\right). \tag{4,10}$$

Формула (4,10) определяет распределение частиц по состояниям при $T < T_0$.

Мы видим, что доля $N(T/T_0)^{3/2}$ всех частиц находится в возбужденных состояниях, а остальные сконденсированы в области фазового пространства, отвечающего нулевой энергии (или $p = 0$).

Аналогия с конденсацией становится еще нагляднее, если найти выражение для давления.

Согласно § 59 ч. III имеем

$$p = \frac{kT}{V}\ln\tilde{Z} = -\frac{kT}{V}\sum\ln\left(1 - e^{-\frac{\varepsilon-\mu}{kT}}\right) =$$
$$= -\frac{kT}{V}\left[\ln\left(1 - e^{\frac{\mu}{kT}}\right) + \sum{}'\ln\left(1 - e^{-\frac{\varepsilon-\mu}{kT}}\right)\right] =$$
$$= -\frac{kT}{V}\ln\left(1 - e^{\frac{\mu}{kT}}\right) - \frac{kT}{V}\int' \frac{d\Gamma}{(2\pi\hbar)^3}\ln\left(1 - e^{-\frac{\varepsilon-\mu}{kT}}\right). \quad (4,11)$$

Штрих означает, что из суммы исключено слагаемое с $\varepsilon = 0$.

В этой формуле мы можем положить $V \to \infty$, поскольку объем макроскопической системы всегда велик. Рассмотрим области $T \gg T_0$ и $T < T_0$. При $T \gg T_0$ и $V \to \infty$ первое слагаемое обращается в нуль. Во втором слагаемом для $\mu$ можно написать выражение (72,14) ч. III для больцмановского газа и мы придем к уравнению (3,10). При $T < T_0$, как показывает анализ уравнения (4,2) для парциального потенциала, первое слагаемое при $V \to \infty$ и $\mu \to 0$ также обращается в нуль.

Поэтому, интегрируя по частям, находим

$$p = \frac{4\pi(2m)^{3/2}}{3(2\pi\hbar)^3}\int_0^\infty \frac{\varepsilon^{3/2}\,d\varepsilon}{e^{\frac{\varepsilon}{kT}} - 1} = \frac{0{,}08m^{3/2}(kT)^{5/2}}{(2\pi\hbar)^3}. \quad (4,12)$$

Давление при $T < T_0$ оказывается не зависящим от плотности. Вклад в давление дают только частицы, находящиеся в состояниях с $\varepsilon \neq 0$. Поскольку их число $\sim T^{3/2}$, полное давление оказывается пропорциональным $T^{5/2}$.

Изотермы бозе-газа имеют вид, представленный на рис. 39, где изображена зависимость давления от удельного объема. В точке $A$, определяемой условием (4,8), удельный объем равен

$$v_0 = \frac{V}{N} = \frac{(2\pi\hbar)^3}{2{,}61\,(2\pi mkT)^{3/2}}. \quad (4,13)$$

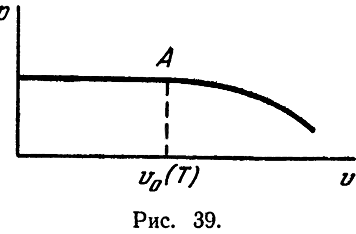


Рис. 39.

Как видно из рис. 39, при $v < v_0$ давление постоянно, а при $v > v_0$ оно падает с ростом удельного объема.

Аналогия между кривой на рис. 39 и изотермой для системы жидкость — пар очевидна. Точка $v = 0$ отвечает конденсированной, область $v > v_0$ — паровой фазе, а $0 < v < v_0$ — области разделения фаз. Аналогия фазовым переходом дополняется тем фактом, что в точке конденсации $T = T_0$ или $v = v_0$ происходит

выделение скрытой теплоты перехода (т. е. фазовый переход I рода).

Мы не будем останавливаться на ее вычислении, но ограничимся двумя замечаниями. Во-первых, наряду со сходством необходимо подчеркнуть различие между процессами конденсации обычного пара и явлением бозе-конденсации. Обычная конденсация и переход в жидкое состояние обусловлены взаимодействием между молекулами.

Бозе-конденсация — процесс, происходящий в идеальном газе. Природа его совершенно иная и он связан исключительно с квантовым эффектом накопления бозе-частиц в состоянии с нулевой энергией.

Второе замечание касается вопроса о реальности явления бозе-конденсации. Совершенно ясно, что поскольку это явление может иметь место только при низких температурах или больших плотностях, при его реализации должно играть важную роль взаимодействие между частицами, которым мы пренебрегли.

Жидкий гелий He II, единственная жидкость не кристаллизующаяся при низких температурах, обнаруживает фазовый переход II рода (см. § 77 ч. III). Частицы $He^4$ имеют спин равный нулю и подчиняются статистике Бозе — Эйнштейна. Однако имеет ли этот фазовый переход в жидкости отношение к явлению бозе-эйнштейновской конденсации в идеальном газе — не установлено. Как мы увидим в следующем параграфе, взаимодействие между частицами в неидеальном бозе-газе имеет весьма существенное значение. Оказывается, что с этим взаимодействием связано принципиальное различие в поведении идеального и неидеального газа бозе-частиц. Это делает несколько сомнительным попытки интерпретации фазового перехода в жидком гелии как проявление бозе-конденсации. Поэтому, несмотря на принципиальный интерес, который представляет явление бозе-конденсации, нет уверенности в том, что оно осуществляется в гелии.

В заключение подчеркнем, что все сказанное относилось исключительно к бозе-системам с фиксированным числом частиц. Однако стационарное состояние бозе-конденсации не может возникать в бозе-системах, у которых число частиц является переменным.

Поскольку число частиц в таких системах не имеет определенного значения, к ним нельзя применять формулу (4,2), которая была положена в основу всей теории бозе-конденсации (см., однако, § 70).

Мы ограничимся в этой главе рассмотрением бозе-частиц В главе, посвященной теории твердого тела, будут более подробно рассмотрены свойства ферми-систем.

## § 5. Неидеальный бозе-газ. Сверхтекучесть

Перейдем теперь к рассмотрению неидеального газа бозе-частиц.

Будем считать, что между частицами бозе-газа существует некоторое достаточно слабое взаимодействие. Оно может иметь характер как сил притяжения, так и сил отталкивания.

Гамильтониан системы частиц в $x$-представлении имеет вид

$$\hat{H} = -\sum_{\alpha=1}^{N} \frac{\hbar^2}{2m} \Delta_\alpha + \frac{1}{2} \sum U(|\boldsymbol{r}_\alpha - \boldsymbol{r}_\beta|),$$

где $N$ — полное число частиц в системе и $U(|\boldsymbol{r}_\alpha - \boldsymbol{r}_\beta|)$ — энергия взаимодействия между частицами $\alpha$ и $\beta$. В разреженном газе можно учитывать только парные взаимодействия.

Для дальнейшего удобно считать газ заключенным в куб с ребром $L$. Тогда оператор Гамильтона свободной частицы

$$\hat{H}_\alpha = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_\alpha$$

будет иметь дискретный спектр. Импульс свободной частицы будет иметь проекции, пробегающие дискретный ряд значений

$$p_x = \frac{2\pi\hbar}{L} n_x, \qquad p_y = \frac{2\pi\hbar}{L} n_y, \qquad p_z = \frac{2\pi\hbar}{L} n_z,$$

где $n_x$, $n_y$, $n_z$ — произвольные целые числа, включая и нуль. Собственные функции оператора $\hat{H}_\alpha$, нормированные на объем $V = L^3$, имеют вид

$$\psi(\boldsymbol{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{\frac{i}{\hbar} \boldsymbol{p}\boldsymbol{r}}.$$

Применим теперь к рассмотрению системы взаимодействующих частиц метод вторичного квантования. Гамильтониан системы с парным взаимодействием дается формулой (99,25) ч. V.

$$\hat{H} = \sum E(\boldsymbol{p}_k) \hat{a}^+_{p_k} \hat{a}_{p_k} + \frac{1}{2} \sum_{i,\, k,\, l,\, m} (lm|\, U\, |ki)\, \hat{a}^+_{p_l} \hat{a}^+_{p_m} \hat{a}_{p_k} \hat{a}_{p_i} = \hat{H}_0 + \hat{H}'. \tag{5,1}$$

Суммирование ведется по всем возможным дискретным значениям импульсов (как положительным, так и отрицательным). Энергия $E(\boldsymbol{p}_k)$ представляет энергию свободной частицы

$$E(\boldsymbol{p}_k) = \frac{p_k^2}{2m}.$$

Входящая в матричный элемент гамильтониана энергия взаимодействия $U$ в силу сказанного зависит только от координат двух частиц.

Для вычисления матричного элемента можно воспользоваться волновыми функциями свободной частицы. Это дает

$$(lm|\,U\,|ik) = \\ = \frac{1}{V^2}\int\limits_V e^{-\frac{i}{\hbar}(p_l r_1 + p_m r_2)}\, U(|r_1 - r_2|)\, e^{\frac{i}{\hbar}(p_i r_1 + p_k r_2)}\, dV_1\, dV_2 .$$

Вводя новые переменные $q = r_1 - r_2$ и $R = (r_1 + r_2)/2$ и интегрируя, с учетом того, что

$$\int\limits_V e^{\frac{i}{\hbar}pr}\, dV = \begin{cases} V & \text{при} \quad p = 0, \\ 0 & \text{при} \quad p \neq 0, \end{cases}$$

получаем

$$(lm|\,U\,|ik) = \begin{cases} \frac{1}{V}\nu(p_l - p_i) & \text{при} \quad p_l + p_m = p_i + p_k, \\ 0 & \text{при} \quad p_l + p_m \neq p_i + p_k, \end{cases} \tag{5,2}$$

где

$$\nu(p) = \int U(|q|)\, e^{-ipq}\, dq.$$

Интегрирование по всем углам можно выполнить непосредственно, поскольку $U$ зависит только от абсолютной величины вектора $q$. Это дает:

$$\nu(p) = \int U(|q|)\, q^2\, dq \int e^{-ipq\cos\theta} \sin\theta\, d\theta \int d\varphi = \\ = 4\pi \int U(|q|)\, \frac{\sin(pq)}{pq}\, q^2\, dq.$$

Мы видим, что функция $\nu(p)$ является вещественной и для нее выполнено равенство $\nu(p) = \nu(-p)$. Оператор полной энергии системы частиц в соответствии с формулой (99,25) ч. V можно представить в виде

$$\hat{H} = \sum_{v_k} \frac{p_k^2}{2m}\, \hat{a}^+_{p_k} \hat{a}_{p_k} + \frac{1}{2} \sum \frac{1}{V}\, \nu(p_l - p_i)\, \hat{a}^+_{p_l} \hat{a}^+_{p_m} \hat{a}_{p_j} \hat{a}_{p_k} . \tag{5,3}$$

Во втором члене формулы (5,3) сумма берется только по таким значениям импульсов $p_i$, $p_k$, $p_l$, $p_m$, для которых выполняется соотношение

$$p_l + p_m = p_i + p_k.$$

Дальнейшая задача заключается в определении собственных значений гамильтониана (5,3), т. е. в приведении матрицы энергии к диагональному виду.

При исследовании низших энергетических состояний теория возмущений неприменима. Наглядно это видно из того, что

в нижних энергетических состояниях, т. е. при малых значениях импульса, кинетическая энергия системы стремится к нулю. Наоборот, энергия взаимодействия имеет конечное значение и велика по сравнению с кинетической энергией. Поэтому для исследования слабо возбужденных состояний Н. Н. Боголюбовым был развит особый приближенный метод. Рассмотрим сначала систему, в которой взаимодействие отсутствует. В основном энергетическом состоянии такой системы импульсы всех частиц равны нулю, т. е.

$$\left.\begin{aligned} n_p &= 0 \quad \text{при} \quad p \neq 0, \\ n_p &= N \quad \text{при} \quad p = 0, \end{aligned}\right\} \tag{5,4}$$

где $n_p$ — число частиц с импульсом $p$. Естественно думать, что и при наличии слабого взаимодействия в низшем состоянии системы большинство частиц будет находиться с импульсами, равными нулю.

В соответствии со сказанным примем, что

$$\left.\begin{aligned} \hat{a}_0^+\hat{a}_0 &= n_0 \approx N, \\ \hat{a}_p^+\hat{a}_p &= n_p \ll N. \end{aligned}\right\} \tag{5,5}$$

Операторы $\hat{a}_0^+$ и $\hat{a}_0$ удовлетворяют перестановочному соотношению (99,9) ч. V

$$\hat{a}_0\hat{a}_0^+ - \hat{a}_0^+\hat{a}_0 = 1.$$

Поскольку $\hat{a}_0^+\hat{a}_0 = n_0$ велико по сравнению с единицей, в дальнейшем будем пренебрегать некоммутативностью этих операторов, т. е. будем заменять операторы $\hat{a}_0$ и $\hat{a}_0^+$ обычными числами.

Предположения (5,4), (5,5) существенно упрощают выражение для гамильтониана взаимодействия. Именно, в сумме по всем импульсам следует оставить только большие слагаемые, в которых множители $\hat{a}_0^+$ или $\hat{a}_0$ входят попарно или четырехкратно. Такими слагаемыми являются

$$\hat{a}_0^+\hat{a}_0^+\hat{a}_0\hat{a}_0, \qquad \hat{a}_0^+\hat{a}_0^+\hat{a}_p\hat{a}_p, \qquad \hat{a}_0^+\hat{a}_p^+\hat{a}_0\hat{a}_p^+$$

и т. п.

Наоборот, слагаемые типа $\hat{a}_0^+\hat{a}_{p_m}^+\hat{a}_{p_l}\hat{a}_{p_k}$, где $p_m \neq 0$, $p_l \neq 0$ и $p_k \neq 0$, малы и могут быть опущены.

Таким образом, для $\hat{H}'$ находим:

$$\hat{H}' = \sum_{p_l+p_m=p_i+p_k} \nu(p_l - p_i)\, \hat{a}^+_{p_l}\hat{a}^+_{p_m}\hat{a}_{p_i}\hat{a}_{p_k} \simeq$$

$$\simeq \sum_{p\neq 0} \nu(p)\left\{\hat{a}^+_p\hat{a}^+_0\hat{a}_p\hat{a}_0 + \hat{a}^+_0\hat{a}^+_p\hat{a}_0\hat{a}_p + \hat{a}^+_0\hat{a}^+_0\hat{a}_p\hat{a}_p + \hat{a}^+_{-p}\hat{a}^+_{-p}\hat{a}_0\hat{a}_0\right\} +$$

$$+ \nu(0)\,\hat{a}^+_0\hat{a}^+_0\hat{a}_0\hat{a}_0 \simeq \nu(0)\,n^2 + \sum_{p\neq 0} \nu(p)\left\{2\hat{a}^+_p\hat{a}_p n_0 + \hat{a}^+_p\hat{a}^+_p n_0 + \hat{a}_{-p}\hat{a}_{-p} n_0\right\}.$$

Поскольку полное число частиц в системе $N$ равно

$$N = n_0 + \sum_{p\neq 0} \hat{a}^+_p\hat{a}_p,$$

где второе слагаемое мало́ по сравнению с первым, в том же приближении имеем

$$\hat{H}' = \sum \nu(p_l - p_i)\, \hat{a}^+_{p_l}\hat{a}^+_{p_m}\hat{a}_{p_i}\hat{a}_{p_k} \simeq$$

$$\simeq \nu(0)\,N^2 + 2N \sum_{p\neq 0} \nu(p)\left\{\hat{a}^+_p\hat{a}_p + \hat{a}^+_{-p}\hat{a}_{-p}\right) +$$

$$+ N \sum_{p\neq 0} \nu(p)\left(\hat{a}^+_p\hat{a}_{-p} + \hat{a}^+_{-p}\hat{a}_p\right). \quad (5,6)$$

Опущенные слагаемые имеют порядок $\sqrt{N}$. Полный гамильтониан $\hat{H}$ с точностью до величины порядка $N$ приобретает вид

$$\hat{H} = \sum_{p\neq 0}\left\{\frac{p^2}{2m} + \frac{n_0}{V}\nu(p)\right\}\hat{a}^+_p\hat{a}_p + \frac{1}{2}\frac{N^2}{V}\nu(0) +$$

$$+ \frac{N}{2V}\sum_{p\neq 0}\nu(p)\,\hat{a}^+_p\hat{a}^+_{-p} + \frac{N}{2V}\sum_{p\neq 0}\nu(p)\,\hat{a}_p\hat{a}_{-p}. \quad (5,7)$$

Введем новые операторы $\hat{b}^+_p$ и $\hat{b}_p$, которые определим следующим образом:

$$\hat{b}_p = \frac{\hat{a}^+_0\hat{a}_p}{\sqrt{n_0}}, \qquad \hat{b}^+_p = \frac{\hat{a}_0\hat{a}^+_p}{\sqrt{n_0}}. \quad (5,8)$$

Определенные таким образом операторы $\hat{b}_p$ и $\hat{b}^+_p$ удовлетворяют тем же перестановочным соотношениям, что и операторы $\hat{a}_p$ и $\hat{a}^+_p$, поскольку $a_0$ и $a^+_0$ мы считаем обычными числами. Кроме того, как легко видеть,

$$\hat{b}^+_p\hat{b}_p = \hat{a}^+_p\hat{a}_p = n_p, \quad (5,9)$$

так как $a_0^+ a_0 = n_0$. С помощью операторов $\hat{b}_p$ и $\hat{b}_p^+$ гамильтониан (5,7) можно записать в виде

$$\hat{H} = \sum_{p \neq 0} \frac{p^2}{2m} \hat{b}_p^+ \hat{b}_p + \frac{1}{2} \frac{N^2}{V} \nu(0) + \frac{n_0}{2V} \sum_{p \neq 0} \nu(p) \left[\hat{b}_p^+ \hat{b}_{-p}^+ + \hat{b}_p \hat{b}_{-p} + 2\hat{b}_p^+ \hat{b}_p\right]. \qquad (5,10)$$

Для приведения гамильтониана (5,10) к диагональному виду совершим линейное преобразование к новым операторам $\hat{\xi}_p$ и $\hat{\xi}_p^+$ по формулам

$$\left.\begin{aligned} \hat{b}_p &= u_p \hat{\xi}_p + v_p \hat{\xi}_{-p}^+, \\ \hat{b}_p^+ &= u_p \hat{\xi}_p^+ + v_p \hat{\xi}_{-p}, \end{aligned}\right\} \qquad (5,11)$$

где

$$u_p^2 - v_p^2 = 1; \qquad u_p = u_{-p}; \qquad v_p = v_{-p}.$$

Если $u_p$ и $v_p$ — вещественные функции импульса $p$, то новые бозе-операторы $\hat{\xi}_p$ и $\hat{\xi}_p^+$ удовлетворяют коммутационным соотношениям (99,9) ч. V. Подставляя (5,11) в (5,10) и требуя, чтобы коэффициенты при операторах типа $\hat{\xi}_p^+ \hat{\xi}_p$ и $\hat{\xi}_p \hat{\xi}_p$ обращались в нуль, найдем функции $u_p$ и $v_p$. Простое, но несколько длинное вычисление дает

$$u_p = \frac{1}{\sqrt{1 - A_p^2}}, \qquad v_p = \frac{A_p}{\sqrt{1 - A_p^2}},$$

$$A_p = \frac{V}{n_0 \nu(p)} \left\{ \varepsilon(p) - \frac{p^2}{2m} - \frac{n_0}{V} \nu(p) \right\},$$

$$\varepsilon(p) = \sqrt{\frac{n_0}{V} \frac{p^2 \nu(p)}{m} + \frac{p^4}{4m^2}}. \qquad (5,12)$$

При этом в операторе $\hat{H}$ сохраняются только диагональные члены и он приводится к виду

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \sum_{p \neq 0} \varepsilon(p) \hat{\xi}_p^+ \hat{\xi}_p. \qquad (5,13)$$

Собственные значения оператора Гамильтона (5,13) равны

$$E = E_0 + \sum_{p \neq 0} \varepsilon(p) n'(p), \qquad (5,14)$$

где

$$E_0 = \frac{N^2}{2V} \nu(0) + \sum_{p \neq 0} \frac{1}{2} \left[\varepsilon(p) - \frac{p^2}{2m} - \frac{n_0}{V} \nu(p)\right], \qquad (5,15)$$

а $n'(p)$ — произвольные целые числа.

Можно найти также полный импульс системы частиц. Он оказывается равным

$$\boldsymbol{P}=\sum_{p\neq 0}\boldsymbol{p}\hat{a}_p^+\hat{a}_p=\sum_p \boldsymbol{p}\hat{b}_p^+\hat{b}_p.$$

Если в последнем равенстве от операторов $\hat{b}_p^+$ и $\hat{b}_p$ перейти к операторам $\hat{\xi}_p^+$ и $\hat{\xi}_p$, то получим

$$\boldsymbol{P}=\sum_p \boldsymbol{p}\hat{\xi}_p^+\hat{\xi}_p=\sum_p \boldsymbol{p}n'_p. \tag{5,16}$$

Формулы (5,14) и (5,16) допускают простую корпускулярную трактовку. Мы видим, что энергия системы представлена в виде суммы двух членов. Первый член $E_0$ представляет собой энергию основного (низшего) состояния. Второй член можно трактовать как энергию квазичастиц, представляющих коллективные возбуждения системы, $n'_p$ — число элементарных возбуждений в состоянии с импульсом $\boldsymbol{p}$. Энергия каждого элементарного возбуждения равна $\varepsilon(\boldsymbol{p})$ (5,12).

При малых импульсах энергия возбуждения представляется в виде

$$\varepsilon(\boldsymbol{p})=\sqrt{\frac{\nu(0)}{mV_0}}\,|\boldsymbol{p}|. \tag{5,17}$$

Здесь $V_0=\frac{V}{n_0}\approx\frac{V}{N}$ представляет объем, приходящийся на одну частицу. Из формулы (5,17) следует, что должно выполняться неравенство

$$\nu(0)=\int U(q)\,d\boldsymbol{q}>0, \tag{5,18}$$

что отвечает преобладанию сил отталкивания. Если, наоборот, $\nu(0)<0$, то энергия оказывается мнимой, что соответствует неустойчивому состоянию системы.

При больших импульсах энергия имеет вид

$$\varepsilon(p)=\frac{p^2}{2m}+\frac{\nu(p)}{V_0}. \tag{5,19}$$

Следует заметить, что существование элементарных возбуждений представляет собой коллективный эффект всей системы. Каждое возбуждение связано с состоянием системы в целом, а не с состоянием отдельной частицы. Идеальный газ возбуждений, характеризуемый гамильтонианом (5,13), подчиняется статистике Бозе, так как операторы $\hat{\xi}_p^+$ и $\hat{\xi}_p$ удовлетворяют перестановочным соотношениям (99,9) ч. V.

Легко показать, что рассматриваемая система обладает свойством сверхтекучести. Предположим, что всей совокупно-

сти частиц сообщена какая-то дополнительная скорость $\boldsymbol{v}$ по отношению к некоторой неподвижной системе, например, по отношению к стенкам трубки или сосуда, содержащего неидеальный бозе-газ. Тогда можно считать, что все полученные результаты будут справедливы в системе, движущейся со скоростью $\boldsymbol{v}$, по отношению к некоторой неподвижной. Если энергия в движущейся системе равна $E$, а в неподвижной $E^v$, то между ними существует соотношение

$$E^v = E + \frac{Nmv^2}{2} + \boldsymbol{v}\boldsymbol{P}, \tag{5,20}$$

где $\boldsymbol{P}$ — полный импульс бозе-газа в подвижной системе. Используя выражение (5,14) и (5,16), получаем

$$E^v = E_0 + \frac{Nmv^2}{2} + \sum_p n'_p \{\varepsilon(p) + \boldsymbol{v}\boldsymbol{p}\}. \tag{5,21}$$

Для того чтобы совокупность частиц затормозилась, надо чтобы появились возбуждения с импульсами, направленными против скорости $\boldsymbol{v}$. Приращение энергии при появлении одного такого возбуждения равно

$$\Delta\varepsilon = \varepsilon(p) - |\boldsymbol{v}||\boldsymbol{p}|. \tag{5,22}$$

Если приращение энергии системы $\Delta\varepsilon > 0$, то появление возбуждений энергетически невыгодно. Это означает, что система будет неопределенно долго двигаться со скоростью $\boldsymbol{v}$ без появления таких возбуждений. Торможение в системе отсутствует и она обладает свойством сверхтекучести. Сформулируем теперь условие сверхтекучести. Для того чтобы величина $\Delta\varepsilon$ была положительной, необходимо выполнение неравенства

$$\frac{\varepsilon(p)}{|\boldsymbol{p}|} > |\boldsymbol{v}|$$

при произвольных $\boldsymbol{p}$. Обозначим минимальную величину отношения $\varepsilon(\boldsymbol{p})/|\boldsymbol{p}|$ через $\boldsymbol{v}^*$. Тогда при движении со скоростью $\boldsymbol{v} < \boldsymbol{v}^*$ имеет место сверхтекучесть. Следовательно, сверхтекучесть в системе возможна, если выполняется неравенство

$$|\boldsymbol{v}^*| = \text{мин}\left(\frac{\varepsilon(p)}{|\boldsymbol{p}|}\right) > 0. \tag{5,23}$$

Из выражения (5,12) для $\varepsilon(\boldsymbol{p})$ следует, что

$$v^* = \left(\frac{\varepsilon(p)}{|\boldsymbol{p}|}\right)_{p\to 0} = \left(\sqrt{\frac{n_0\nu(p)}{Vm} + \frac{p^2}{4m^2}}\right)_{p\to 0} = \sqrt{\frac{n_0\nu(0)}{mV}}.$$

Если $\nu(0) > 0$, то $v^*$ вещественна и положительна. Таким образом, в случае преобладания сил отталкивания в неидеальном бозе-газе существует вещественное и положительное значение $v^*$ и бозе-газ обладает свойством сверхтекучести.

В случае, если взаимодействие между частицами отсутствует (идеальный бозе-газ), то $U(q) = 0$, $\nu(p) = 0$ и энергия возбуждений дается формулой

$$\varepsilon(p) = \frac{p^2}{2m}. \tag{5,24}$$

При этом $v^* = 0$, так что идеальный бозе-газ не обладает сверхтекучестью.

Таким образом, мы видим, что свойство сверхтекучести проявляется в неидеальном и отсутствует в идеальном бозе-газе. Сверхтекучесть не связана со спецификой системы бозе-частиц. Для ее существования требуется особая формула энергетического спектра коллективных возбуждений системы. Именно, согласно (5,23), для этого нужно, чтобы отношение минимальной энергии возбуждения системы как целого к импульсу этого возбуждения имело конечное значение.

Спектр возбуждений газа невзаимодействующих бозе-частиц при малых возбуждениях имеет вид (5,24) и не удовлетворяет (5,23).

Спектр возбуждений газа взаимодействующих бозе-частиц удовлетворяет условию (5,23) только в случае наличия сил отталкивания между частицами. Силы притяжения не приводят к сверхтекучести системы взаимодействующих бозе-частиц. Необходимо, однако, подчеркнуть, что при получении этого результата было существенно использовано свойство бозе-частиц: мы полагали, что основная масса взаимодействующих частиц находится в состоянии с импульсом равным нулю, т. е. образует конденсат в пространстве импульсов. Это служит необходимым условием для появления сверхтекучести бозе-газа; однако указанное условие не является достаточным, поскольку в идеальном бозе-газе также образуется конденсат, но нет сверхтекучести. Различие между конденсатом идеального и неидеального бозе-газа видно из следующего рассуждения: пусть идеальный бозе-газ как целое движется с некоторой скоростью $v$ относительно стенок сосуда. Если одна из частиц в результате взаимодействия со стенкой остановится, то остальная масса газа будет продолжать движение с меньшей кинетической энергией. Последовательное повторение этого процесса в конечном счете затормозит газ.

Иначе обстоит дело в случае газа, частицы которого связаны между собой силами отталкивания. Остановка отдельных

частиц здесь невозможна. Взаимодействие со стенкой должно тормозить или, что то же самое, возбуждать всю систему как целое. При скорости движения $v < v^*$ это оказывается невозможным.

Представлялось естественным перенести этот вывод, полученный для неидеального бозе-газа, на бозе-жидкость. Хотя формально предположение о парном характере взаимодействия в жидкости не выполнено, качественные рассуждения о спектре малых возбуждений коллективного движения относятся и к бозе-жидкости [1]).

---

[1]) См. K. Brueckner, K. Sawada, Phys. Rev. **106**, 1117, 1128 (1957). О сверхтекучести см. И. М. Халатников, Введение в теорию сверхтекучести, «Наука», 1965.

ГЛАВА II

# ФИЗИЧЕСКАЯ КИНЕТИКА

## § 6. Постановка проблемы

Наряду с рассмотрением равновесных состояний макроскопических систем, не меньший интерес для современной физики представляет изучение поведения макроскопических систем, не находящихся в состоянии полного термодинамического равновесия. Процессы, происходящие в системах, не находящихся в состоянии термодинамического равновесия, являются необратимыми. Изучение необратимых процессов представляет цель и содержание физической кинетики.

Совершенно очевидно, что свойства неравновесных макросистем, подвергающихся внешним воздействиям и эволюционирующим во времени, неизмеримо сложнее, чем свойства равновесных систем. Это видно хотя бы из бесконечного разнообразия внешних воздействий, которые могут нарушать равновесие в системе.

Поэтому не удивительно, что в настоящее время физическая кинетика не достигла в своем развитии той степени полноты и универсальности, которая характерна для статистической физики.

Мы должны прежде всего сформулировать некоторые общие законы изменения состояний макроскопических систем, не находящихся в состоянии равновесия.

При этом возможны два подхода к решению задачи — квазимакроскопический и кинетический.

При квазимакроскопическом рассмотрении состояние системы задается некоторыми макроскопическими параметрами — температурой, концентрацией и т. п. Ищется закон изменения этих параметров в пространстве и во времени, если система не находится в состоянии равновесия, но подвержена действию внешних сил. При этом предполагается, что изменения состояний макроскопической системы можно характеризовать вероятностью перехода из одного макроскопического состояния в другое. Иначе говоря, предполагается, что можно ввести понятие

в вероятном изменении макроскопических параметров, характеризующих систему.

При кинетическом подходе к решению задач физической кинетики предполагается, что система может описываться некоторой функцией распределения, зависящей в общем случае от обобщенных координат и импульсов частиц. Считая заданными вероятности переходов из одних микросостояний в другие (т. е. перехода изобразительной точки из одной клетки фазового пространства в другую), составляют закон изменения функции распределения, так называемое кинетическое уравнение. Решение последнего позволяет найти функцию распределения неравновесной системы. Ясно, что кинетический подход является более детальным. Он, в частности, позволяет рассчитывать такие величины, как кинетические коэффициенты — теплопроводность, коэффициент диффузии и т. п.

Откладывая обсуждение второго подхода к изучению неравновесных систем, обсудим сначала квазимакроскопический метод. Ясно, что он имеет ограниченную область применимости: если некоторая система не находится в равновесии, то ее состояние в общем случае невозможно охарактеризовать при помощи макроскопических параметров; например, в общем случае нельзя говорить о температуре или давлении в теле, не находящемся в состоянии равновесия. Эти понятия, как мы видели ранее, имеют определенный смысл лишь в системе, помещенной в термостат. Тем не менее важная особенность макроскопических систем, которая уже обсуждалась нами в § 24 и § 25 ч. III, позволяет в ряде случаев пользоваться макроскопическими величинами для описания состояния неравновесных систем.

Именно, мы видели, что в системе, не находящейся в состоянии равновесия и предоставленной самой себе, возникает явление релаксации. По прошествии времени релаксации система переходит в равновесное состояние. В реальной макроскопической системе очень часто приближение к состоянию равновесия сопровождается протеканием целого ряда процессов. Поясним это на простом примере.

Пусть в сосуд впускается два газа, молекулы которых имеют существенно различные массы, например, газы ионов и электронов. Переходу системы в состояние равновесия отвечает последовательность процессов: 1) газы, перемешиваясь, равномерно заполняют сосуд; 2) в газах устанавливается статистическое равновесие; при этом благодаря различию в массах, затрудняющему обмен импульсами частиц разных газов при столкновениях, эффективны только столкновения между одинаковыми частицами, в результате которых по прошествии времен релаксации $\tau_1$ и $\tau_2$ в каждом из газов установится свое

максвелловское распределение; 3) в результате обмена импульсами при столкновениях между частицами с разной массой по прошествии значительно большего времени релаксации $\tau_3$ установится общее максвелловское распределение в смеси газов; 4) захват электронов ионами, сопровождающийся излучением соответствующей энергии, в известных условиях приведет к переходу газа в нейтральное равновесное состояние (время $\tau_4$). Таким образом, приближение газа к полному равновесию происходит в несколько стадий, имеющих существенно отличающиеся друг от друга времена релаксации.

Указанными свойствами обладает очень широкий класс физических систем, в частности, любые системы, состоящие из малых частей. Поскольку время релаксации быстро растет с увеличением размеров системы, равновесие внутри частей устанавливается быстрее, чем между частицами (ср. § 25 ч. III).

Часто на практике большой интерес представляет изучение систем, у которых успело установиться равновесие за время релаксации $\tau_{\text{быстр}}$ по отношению к быстрым процессам, но не успело установиться равновесие для медленно изменяющихся параметров. Такие системы называются находящимися в состоянии неполного равновесия, или квазиравновесными системами.

Рассмотренная нами смесь находится в неполном равновесии. Если время $t$, прошедшее с момента смешения, удовлетворяет неравенству

$$\tau_1,\ \tau_2 \ll t \ll \tau_3,$$

каждая из равновесных частей, газ электронов и газ ионов, может характеризоваться обычными макроскопическими параметрами. Однако, в отличие от равновесных систем, эти параметры будут медленно изменяться во времени.

Если та же смесь газов не изолирована, но находится в поле внешних сил, например, в электрическом поле, то ее состояние будет изменяться под влиянием поля. В поле, постоянном во времени, обе системы при $t \gg \tau_1, \tau_2$ также можно считать не зависящими от времени, но не равновесными. Действительно, в рассматриваемой системе возникает систематическое движение (поток) зарядов в направлении поля.

Неравновесное состояние системы, не зависящее от времени, называют стационарным состоянием. В стационарном состоянии, как и в состоянии неполного равновесия, система может характеризоваться значениями макроскопических параметров.

Из сказанного выше следует, что квазимакроскопическое рассмотрение неравновесных систем возможно в том случае, когда в последних происходят быстрые и медленные процессы.

Недостатком приведенных рассуждений является условность понятий быстрого и медленного процесса. Для конкретных систем часто удается провести это разбиение достаточно четко. Ясно, что необходимым условием такого разбиения является требование $\tau_{\text{медл.}} \gg \tau_{\text{быстр.}}$.

Если система находится в состоянии неполного равновесия, то к ней или к ее макроскопическим частям применимы термодинамические понятия, такие, как температура, термодинамические потенциалы и т. п.

Можно, например, говорить о системе с давлением или температурой, изменяющимися от точки к точке или изменяющейся во времени.

Часто в макроскопической системе, не находящейся в равновесии, происходит перемещение частей и возникает перенос массы. При этом, однако, можно характеризовать эти части термодинамическими параметрами — плотностью, давлением и температурой.

В дальнейшем мы сформулируем эмпирические законы переноса в таких неравновесных системах, а затем перейдем к выводу теоретических соотношений, характеризующих поведение неравновесных систем.

## § 7. Закон сохранения массы и диффузионный поток

Как мы указывали уже в § 6, нарушение равновесия в системе часто связано с макроскопическим движением ее частей. Разобьем макроскопическую систему на малые, но все еще макроскопические элементы и примем, что эти элементы находятся в состоянии локального равновесия. Это означает, что каждому элементу можно приписать обычные термодинамические характеристики — определенную температуру, среднюю плотность и термодинамические потенциалы.

Ниже, на примере простейшей системы — идеального газа, мы увидим, что такое локальное равновесие для малых элементов устанавливается чрезвычайно быстро. Отклонение от состояния равновесия системы как целого и, в частности, механическое движение ее частей, не нарушает локального равновесия в малых элементах. Приняв допущение о локальном равновесии в малых элементах и отсутствии равновесия для системы в целом, т. е. считая систему находящейся в неполном равновесии, можно сформулировать общие законы изменения состояния такой системы. При этом необходимо учесть происходящее в ней внутреннее движение.

Мы будем отвлекаться от молекулярной структуры системы и считать ее сплошной средой. Это означает, что в каждой точке системы считается заданной скорость перемещения $\boldsymbol{V}(\boldsymbol{r}, t)$,

являющаяся непрерывной функцией координат $\mathbf{r}$ и времени $t$.

Сплошная среда может быть капельной жидкостью, газом или твердым телом, части которых перемещаются друг относительно друга под действием приложенных внешних сил. Плотность, давление, температура и другие термодинамические характеристики среды будут считаться непрерывными функциями координат и времени. Чтобы не возникло недоразумения, подчеркнем, что зависимость термодинамических величин от координат и времени следует понимать как изменение локальных равновесных характеристик. Например, энергия $E$ некоторого малого (но макроскопического) элемента системы изменяется при перемещении его из места с давлением $p_1$ и температурой $T_1$ в другое место со значениями этих величин $p_2$ и $T_2$. Однако в каждом месте связь между $E$, $p$ и $T$ имеет равновесный термодинамический характер.

Приближение сплошной среды соответствует термодинамическому описанию равновесных систем. В этом приближении мы сформулируем общие законы, определяющие движение среды и перенос в ней вещества и энергии. При этом, естественно, мы будем вынуждены пользоваться некоторыми эмпирическими соотношениями. Эти последние не будут иметь той общности, которой обладают эмпирические законы (первое и второе начало) термодинамики, поскольку, как мы уже подчеркивали, неравновесные системы обнаруживают большое разнообразие свойств, зависящих от их конкретной структуры и характере процессов.

Одной из важнейших задач макроскопической кинетики является вывод уравнений переноса в сплошной среде и нахождение фигурирующих в этих уравнениях постоянных, именуемых кинетическими коэффициентами.

Такими общими уравнениями переноса являются уравнения переноса массы, импульса, энергии и энтропии. Прежде всего сформулируем закон переноса массы. В системе из $n$-компонент имеет место закон сохранения массы каждого из компонент. Если обозначить через $\mathbf{v}_\alpha$ среднюю макроскопическую скорость $\alpha$-ой компоненты, а через $\rho_\alpha$ — ее массу в единицу объема, то закон сохранения массы можно написать в виде

$$\frac{\partial \rho_\alpha}{\partial t} + \operatorname{div} \rho_\alpha \mathbf{v}_\alpha = 0. \qquad (7,1)$$

При этом предполагается, что между компонентами не происходит химической реакции. В более общем случае в правой части (7,1) следовало бы написать скорость возникновения или исчезновения частиц $\alpha$-го компонента, отнесенную к единице

объема. Уравнение (2,1) и является уравнением переноса массы.

Движение в системе удобнее характеризовать скоростью центра масс, а не скоростями компонент. По определению, скорость центра масс $\boldsymbol{v}$ равна

$$\boldsymbol{v} = \frac{\sum \rho_\alpha \boldsymbol{v}_\alpha}{\sum \rho_\alpha} = \frac{\sum \rho_\alpha \boldsymbol{v}_\alpha}{\rho}, \tag{7,2}$$

где $\rho$ — полная плотность в системе.

Суммируя (7,1) по всем компонентам, легко найдем связь между $\rho$ и $\boldsymbol{v}$:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} \rho \boldsymbol{v} = 0. \tag{7,3}$$

Это так называемое гидродинамическое уравнение непрерывности, выражающее закон сохранения массы всей системы. Если полная плотность среды постоянная, то $\partial \rho / \partial t = 0$ и вместо (7,3) можно написать

$$\operatorname{div} \boldsymbol{v} = 0. \tag{7,4}$$

Среды с постоянной плотностью именуются несжимаемыми. В гидродинамике показывается, что если скорость движения сплошной среды (жидкости или газа) мала по сравнению со скоростью звука, то такую среду можно считать несжимаемой.

Перепишем (7,1) в виде

$$\frac{\partial \rho_\alpha}{\partial t} + \boldsymbol{v}_\alpha \operatorname{grad} \rho_\alpha = -\rho_\alpha \operatorname{div} \boldsymbol{v} - \operatorname{div} \rho_\alpha (\boldsymbol{v}_\alpha - \boldsymbol{v})$$

или

$$\frac{d\rho_\alpha}{dt} = -\rho_\alpha \operatorname{div} \boldsymbol{v} - \operatorname{div} \boldsymbol{j}_\alpha, \tag{7,5}$$

где через $\boldsymbol{j}_\alpha$ обозначен так называемый диффузионный поток $\alpha$-го компонента

$$\boldsymbol{j}_\alpha = \rho_\alpha (\boldsymbol{v}_\alpha - \boldsymbol{v}). \tag{7,6}$$

Формула (7,5) выражает закон сохранения массы $\alpha$-го компонента. Вектор $\boldsymbol{j}_\alpha$ показывает, в какой мере движение частиц $\alpha$-го компонента отличается от средней скорости движения системы как целого. Обычно закон сохранения массы для $\alpha$-го компонента переписывают, вводя массовую концентрацию

$$c_\alpha = \frac{\rho_\alpha}{\rho}. \tag{7,7}$$

При этом вместо (7,5), с учетом (7,3), получаем

$$\frac{dc_\alpha}{dt} = -\frac{1}{\rho} \operatorname{div} \boldsymbol{j}_\alpha. \tag{7,8}$$

Очевидно, что в системе из $n$-компонент независимыми являются $(n-1)$ концентрация и $(n-1)$ диффузионный поток, поскольку

$$\sum_\alpha c_\alpha = 1; \qquad \sum_\alpha j_\alpha = 0. \tag{7,9}$$

Разумеется, в однокомпонентной жидкости диффузионный поток отсутствует. При этом закон сохранения массы выражается формулой (7,3).

Для краткости записи рассмотрим двухкомпонентную систему, в которой независимыми являются одна концентрация и один диффузионный поток.

В отсутствии внешних полей условиями равновесия служат постоянство парциального потенциала и температуры в системе (ср. § 36 ч. III). Диффузионный поток в равновесии равен нулю.

Перейдем теперь к системе, находящейся в неравновесном состоянии. При достаточно малых отклонениях системы от состояния равновесия естественно принять, что возникающий диффузионный поток пропорционален градиенту парциального потенциала $\mu(p, c, T)$:

$$j = -\gamma \nabla \mu. \tag{7,10}$$

Примем, что $\gamma > 0$. При этом знак минус показывает, что возникающий поток будет направлен к месту с меньшим парциальным потенциалом. Это соответствует требованию минимальности парциального потенциала в состоянии равновесия. Формула (7,10) представляет, по существу, первый член разложения в ряд по степеням величины $\nabla\mu$ и теряет смысл при больших отклонениях от состояния равновесия.

Мы ограничимся в этом параграфе случаем изотермической системы.

В изотермической системе можно написать

$$j_\alpha = -\gamma \left(\frac{\partial \mu}{\partial c_\alpha}\right)_{p,T} \nabla c_\alpha - \gamma \left(\frac{\partial \mu}{\partial p}\right)_{T,c_\alpha} \nabla p = -\rho D_\alpha \nabla c_\alpha - \frac{k_p^{(\alpha)}}{p} \nabla p, \tag{7,11}$$

где введены два новых коэффициента:

коэффициент молекулярной диффузии

$$D_\alpha = \frac{\gamma}{\rho} \left(\frac{\partial \mu}{\partial c_\alpha}\right)_{p,T} \tag{7,12}$$

и коэффициент бародиффузии

$$\frac{k_p^{(\alpha)}}{p} = \frac{\gamma \left(\frac{\partial \mu}{\partial p}\right)_{c,T}}{\rho D_\alpha}. \tag{7,13}$$

Обычно коэффициент бародиффузии весьма мал и вторым слагаемым в (7,11) можно пренебречь. Тогда диффузионный поток

приобретает вид

$$j_\alpha = -\rho D_\alpha \nabla c_\alpha. \tag{7,14}$$

Часто вместо массовой концентрации $c_\alpha$ пользуются числом частиц в единице объема, а диффузионный поток относят не к массе, а к числу частиц. При этом

$$j_\alpha = -D_\alpha \nabla c_\alpha. \tag{7,15}$$

Формулы (7,11) (7,14), (7,15) представляют известный эмпирический закон диффузии (закон Фика).

Ниже мы увидим, что в неизотермических системах закон диффузии должен быть несколько обобщен. В дальнейшем мы убедимся также, что закон диффузии может быть выведен теоретически для случая идеального газа из общих законов физической кинетики.

С учетом (7,11) закон сохранения массы запишется в виде

$$\frac{dc_\alpha}{dt} = D\,\Delta c_\alpha + k_p^\alpha \operatorname{div}\frac{\nabla p}{p} \tag{7,16}$$

или, пренебрегая бародиффузией,

$$\frac{\partial c_\alpha}{\partial t} + (\boldsymbol{v}\,\nabla c_\alpha) = D_\alpha \Delta c_\alpha. \tag{7,17}$$

Последнее выражение носит название уравнения конвективной диффузии. Оно описывает как конвективный перенос вещества в движущейся среде, так и молекулярную диффузию.

## § 8. Закон сохранения импульса и уравнения движения сплошной среды

В предыдущем параграфе мы считали движение сплошной среды заданным. Сейчас мы перейдем к получению уравнений движения сплошной среды под действием приложенных к системе внешних сил.

Для этого напишем уравнения движения некоторого малого (но конечного) элемента объема $V$ в среде в виде

$$\frac{d}{dt}\int \rho\boldsymbol{v}\,dV = \int \boldsymbol{F}\,dV + \oint \boldsymbol{F}^{(n)}\,dS, \tag{8,1}$$

где $\boldsymbol{F}$ — объемная сила, отнесенная к единице объема и $\boldsymbol{F}^{(n)}$ — поверхностная сила, действующая на 1 *см*$^2$ поверхности, ограничивающий данный объем со стороны окружающей среды. Вектор $\boldsymbol{F}^{(n)}$ носит название напряжения. Для задания напряжения требуется указать направление вектора нормали к поверхности $\boldsymbol{n}$.

Введем элементарный параллелепипед, ограниченный плоскостями $\boldsymbol{n}_1 = \boldsymbol{i}$, $\boldsymbol{n}_2 = \boldsymbol{j}$, $\boldsymbol{n}_3 = \boldsymbol{k}$. Вектор $\boldsymbol{F}^{(i)}$ имеет, очевидно, компоненты $F_{xx}$, $F_{yx}$, $F_{zx}$, каждая из которых представляет

компонент силы, действующей на площадку 1 $см^2$ с нормалью $\boldsymbol{i}$. Аналогичный смысл имеют проекции векторов $\boldsymbol{F}^{(j)}$ и $\boldsymbol{F}^{(k)}$.

Мы можем ввести тензор напряжений $\sigma_{ik}$, определив его равенством

$$\sigma_{ik} n_k = F_i^{(n_k)}. \qquad (8,2)$$

Очевидно, что компоненты тензора $\sigma_{ik}$ совпадают с компонентами $\boldsymbol{F}^{(n)}$. Преобразуем поверхностный интеграл в объемный по формуле Гаусса — Остроградского

$$\oint \boldsymbol{F}^{(n)}\, dS = \int \sigma_{ik} n_i\, dS = \int \frac{\partial \sigma_{ik}}{\partial x_k}\, dV.$$

Тогда окончательно имеем *)

$$\frac{d}{dt} \int \rho v_i\, dV = \int \rho \frac{dv_i}{dt}\, dV = \int F_i\, dV + \int \frac{\partial \sigma_{ik}}{\partial x_k}\, dV. \qquad (8,3)$$

Поскольку объем $V$ является произвольным, из (8,3) следует

$$\rho \frac{dv_i}{dt} = F_i + \frac{\partial \sigma_{ik}}{\partial x_k} \qquad (8,4)$$

или, если внешние объемные силы являются консервативными, то

$$\rho \frac{dv_i}{dt} \equiv \rho \left( \frac{\partial v_i}{\partial t} + v_k \frac{\partial v_i}{\partial x_k} \right) = -\frac{\partial U}{\partial x_i} + \frac{\partial \sigma_{ik}}{\partial x_k}, \qquad (8,5)$$

где $U$ — потенциальная энергия единицы объема. Уравнения (8,4) или (8,5) выражают закон движения сплошной среды.

Уравнение (8,5) можно переписать в другой форме, несколько преобразовав его левую часть.

Именно, пользуясь уравнением непрерывности, можем написать

$$\rho \frac{\partial v_i}{\partial t} = \frac{\partial (\rho v_i)}{\partial t} - v_i \frac{\partial \rho}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t} (\rho v_i) + v_i \frac{\partial}{\partial x_k} (\rho v_k).$$

Поэтому имеем

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho v_i = -\frac{\partial}{\partial x_k} (\rho v_i v_k - \sigma_{ik}) - \frac{\partial U}{\partial x_i}. \qquad (8,6)$$

В левой части (8,6) стоит изменение импульса единицы объема. Первый член слева представляет плотность потока импульса $j_{ik} = \rho v_i v_k - \sigma_{ik}$. Таким образом, (8,6) выражает закон сохранения импульса. Тензор напряжений $\sigma_{ik}$ может быть связан со скоростями $v_i$ и $v_k$ на основе опытных данных.

---

*) Очевидно, что $\int v_i \frac{d}{dt} \rho\, dV = 0$.

В состоянии равновесия, когда скорость движения среды обращается в нуль, можно написать условие термодинамического (механического) равновесия:

$$F_i = \frac{\partial p}{\partial x_i}. \qquad (8,7)$$

Сравнивая (8,4) и (8,7), приходим к выводу, что в неподвижной жидкости

$$\sigma_{ik} = -p\delta_{ik}. \qquad (8,8)$$

В движущихся сплошных средах, как показывает опыт, возникают необратимые процессы. Написать выражение для $\sigma_{ix}$, справедливое для всех подвижных сред — жидкостей, газов и твердых тел, — при любых режимах течения не представляется возможным.

Мы ограничимся наиболее изученным (хотя и не самым распространенным) случаем так называемых ньютоновских жидкостей. В ньютоновских жидкостях тензор напряжений является линейной функцией градиента скорости.

При плоском течении между двумя твердыми стенками, одна из которых покоится, а другая движется со скоростью $v$, на поверхность твердого тела действует напряжение

$$\sigma_{xy} = \eta \frac{v}{L},$$

где $L$ — расстояние между стенками. Нетрудно заметить, что в этих условиях $\sigma_{xy} = \text{const}$. Следовательно, такое же напряжение действует на 1 $см^2$ воображаемой плоскости, проведенной в жидкости. При произвольном законе движения для $\sigma_{ik}$ можно написать общее выражение, исходя из двух требований:

1) $\sigma_{ik}$ является линейной функцией производных $\partial v_i/\partial x_k$ или $\partial v_k/\partial x_i$ ($i, k = 1, 2, 3$);

2) при равномерном вращении жидкости как целого $\sigma_{ik}$ сводится к его статистическому выражению, поскольку взаимного смещения слоев жидкости при этом не происходит.

Комбинациями производных, удовлетворяющими этому условию, являются

$$\alpha_{ik} = \alpha\left(\frac{\partial v_i}{\partial x_k} + \frac{\partial v_k}{\partial x_i}\right); \quad \beta \frac{\partial v_i}{\partial x_i}. \qquad (8,9)$$

Непосредственной проверкой можно убедиться, что при $v = [\omega r]$, где $\omega$ — угловая скорость, эти комбинации производных обращаются в нуль. Поэтому в самом общем случае можно написать

$$\sigma_{ik} = -p\delta_{ik} + \alpha\left(\frac{\partial v_i}{\partial x_k} + \frac{\partial v_k}{\partial x_i}\right) + \beta \frac{\partial v_j}{\partial x_j}\delta_{ik}.$$

Обычно это выражение записывают в тождественном виде

$$\sigma_{ik} = -p\delta_{ik} + \eta\left(\frac{\partial v_i}{\partial x_k} + \frac{\partial v_k}{\partial x_i} - \frac{2}{3}\delta_{ik}\frac{\partial v_j}{\partial x_j}\right) + \zeta\delta_{ik}\frac{\partial v_j}{\partial x_j} = -p\delta_{ik} + \sigma'_{ik},$$

где обозначено

$$\eta = \alpha, \tag{8,10}$$

$$\zeta - \frac{2}{3}\eta = \beta. \tag{8,11}$$

Кинетические коэффициенты $\eta$ и $\zeta$ носят названия первого и второго коэффициентов вязкости.

В несжимаемой жидкости $\frac{\partial v_j}{\partial x_j} = 0$ и тензор напряжений приобретает вид

$$\sigma_{ik} = -p\delta_{ik} + \eta\left(\frac{\partial v_i}{\partial x_k} + \frac{\partial v_k}{\partial x_i}\right). \tag{8,12}$$

Ньютоновский закон вязкости имеет место у газов и некоторых капельных жидкостей (прежде всего у воды).

Вязкость является функцией температуры

$$\eta = \begin{cases} \sqrt{T} & \text{у газов,} \\ e^{-\frac{c}{T}} & \text{у капельных жидкостей.} \end{cases} \tag{8,13}$$

Ниже будет показано, что как выражение для тензора напряжений (8,12), так и температурная зависимость вязкости в случае газов могут быть найдены теоретически.

Пользуясь выражением для $\sigma_{ik}$, можно представить уравнение движения несжимаемой жидкости в виде

$$\rho\left(\frac{\partial v_i}{\partial t} + v_k\frac{\partial v_i}{\partial x_k}\right) = F_i - \frac{\partial p}{\partial x_i} + \eta\frac{\partial}{\partial x_k}\left(\frac{\partial v_i}{\partial x_k} + \frac{\partial v_k}{\partial x_i}\right)$$

или

$$\rho\left(\frac{\partial v_i}{\partial t} + v_k\frac{\partial v_i}{\partial x_k}\right) = F_i - \frac{\partial p_i}{\partial x_i} + \eta\frac{\partial^2 v_i}{\partial x_k^2}. \tag{8,14}$$

Последнее уравнение носит название уравнения Навье — Стокса.

Уравнение Навье — Стокса может быть переписано в виде

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho v_i) = -\frac{\partial}{\partial x_k}\left\{\rho v_i v_k + p\delta_{ik} - \eta\left(\frac{\partial v_i}{\partial x_k} + \frac{\partial v_k}{\partial x_i}\right)\right\} + F_i$$

или

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho v_i) = -\frac{\partial \Pi_{ik}}{\partial x_k} + F_i,$$

где

$$\Pi_{ik} = \rho v_i v_k + p\delta_{ik} - \eta\left(\frac{\partial v_i}{\partial x_k} + \frac{\partial v_k}{\partial x_i}\right) = \rho v_i v_k - \sigma_{ik}. \qquad (8,15)$$

Интегрируя обе части (8,15) по объему и преобразуя интеграл к поверхностному, имеем

$$\frac{\partial}{\partial t}\int \rho v_i\, dV = -\oint \Pi_{ik}\, dS_k. \qquad (8,16)$$

Последняя формула выражает, очевидно, закон сохранения импульса: изменение импульса в данном объеме жидкости равно потоку импульса, выражающемуся через окружающую его поверхность. Тензор $\Pi_{ik}$ представляет собой тензор плотности потока импульса в несжимаемой жидкости.

## § 9. Закон сохранения энергии и перенос энтропии в движущейся сплошной среде

Энергия движущейся сплошной среды складывается из ее внутренней энергии $E$ и кинетической энергии $\rho v^2/2$. При этом мы относим соответствующие величины к единице массы жидкости и не учитываем потенциальной энергии во внешем поле сил *).

Закон сохранения энергии может быть написан в интегральной или дифференциальной форме

$$\frac{d}{dt}\int\left(\rho E + \rho\frac{v^2}{2}\right)dV = -\oint \boldsymbol{j}_E\, d\boldsymbol{S}, \qquad (9,1)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(\rho E + \rho\frac{v^2}{2}\right) = -\operatorname{div}\boldsymbol{j}_E, \qquad (9,2)$$

где $\boldsymbol{j}_E$ — плотность потока энергии.

Найдем прежде всего производную $\frac{\partial}{\partial t}\rho\frac{v^2}{2}$, воспользовавшись уравнением (8,6). Умножая его на $v_i$, имеем

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho\frac{v^2}{2} \equiv \frac{\partial}{\partial t}\rho\frac{v_i^2}{2} = -v_i\frac{\partial}{\partial x_k}(\rho v_i v_k - \sigma_{ik}) =$$

$$= -\frac{\partial}{\partial x_k}\left(\rho\frac{v^2 v_k}{2} - \sigma_{ik}v_i\right) - \sigma_{ik}\frac{\partial v_i}{\partial x_k}. \qquad (9,3)$$

Полученное уравнение допускает наглядную интерпретацию: первый член в первой части представляет плотность потока кинетической энергии. Он состоит из непосредственно переносимой

---

*) См. книгу С. де Гроот и П. Мазур, Неравновесная термодинамика, «Мир», 1964.

кинетической энергии $\rho\frac{v^2}{2}\boldsymbol{v}$ и потока, связанного с механической работой $\sigma_{ik}v_i$, совершаемой над средой. Последнее слагаемое, как видно из дальнейшего, включает диссипацию энергии, обусловленную вязкостью.

Именно, в несжимаемой жидкости согласно (8,12) можно написать

$$\sigma_{ik}\frac{\partial v_i}{\partial x_k} = -p\delta_{ik}\frac{\partial v_i}{\partial x_k} + \eta\left(\frac{\partial v_i}{\partial x_k} + \frac{\partial v_k}{\partial x_i}\right)\frac{\partial v_i}{\partial x_k} =$$
$$= -p\frac{\partial v_k}{\partial x_k} + \frac{\eta}{2}\left(\frac{\partial v_i}{\partial x_k} + \frac{\partial v_k}{\partial x_i}\right)^2 = \frac{\eta}{2}\left(\frac{\partial v_i}{\partial x_k} + \frac{\partial v_k}{\partial x_i}\right)^2. \quad (9,4)$$

В несжимаемой жидкости уравнение (9,3) приобретает вид

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho\frac{v^2}{2} =$$
$$= -\frac{\partial}{\partial x_k}\left[\left(\rho\frac{v^2}{2} + p\right)v_k - \eta v_i\left(\frac{\partial v_i}{\partial x_k} + \frac{\partial v_k}{\partial x_i}\right)\right] - \frac{\eta}{2}\left(\frac{\partial v_i}{\partial x_k} + \frac{\partial v_k}{\partial x_i}\right)^2. \quad (9,5)$$

Мы видим, что изменение кинетической энергии в данном объеме связано с вытекающим из этого объема потоком энергии и величиной, не имеющей характера потока и пропорциональной вязкости. Ясно, что эта последняя представляет диссипацию энергии. Поскольку диссипация связана с уменьшением кинетической энергии, всегда $\eta > 0$.

Возвращаясь к уравнению сохранения полной энергии (9,2), преобразуем его так, чтобы получить закон изменения внутренней энергии.

Вычитая (9,3) из (9,2), находим

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho E) = \frac{\partial}{\partial x_k}\left(\rho\frac{v^2}{2}v_k - \sigma_{ik}v_i\right) + \sigma_{ik}\frac{\partial v_i}{\partial x_k} - \frac{\partial j_E^{(k)}}{\partial x_k}. \quad (9,6)$$

Плотность потока полной энергии $j_E$ в изотермической жидкости, по определению, слагается из потока полной энергии, переносимого жидкостью, и потока энегии, обусловленного механической работой:

$$\left(j_E^{(k)}\right)_{\text{isoterm}} = \left(E\rho + \rho\frac{v^2}{2}\right)v_k - \sigma_{ik}v_i. \quad (9,7)$$

При $\boldsymbol{v} = 0$, т. е. в неподвижной среде, поток энергии отсутствует.

Если, однако, жидкость не изотермична, то в ней возникает поток энергии даже в состоянии покоя. Поскольку условием термодинамического равновесия служит условие постоянства температуры, при достаточно малых отклонениях от равновесия естественно положить этот поток энергии равным

$$j_T = -\varkappa\nabla T, \quad (9,8)$$

где $\varkappa$ — кинетический коэффициент, именуемый теплопроводностью. Вектор $j_T$ называют плотностью потока тепла. Поскольку вектор $j_T$ направлен в сторону уменьшения температуры, всегда $\varkappa > 0$. Разумеется, закон переноса (9,7) является эмпирическим и выполняется лишь при малых отклонениях от теплового равновесия.

Вектор плотности полного потока энергии в общем случае неизотермической среды можно написать в виде

$$j_E^{(k)} = -\varkappa \frac{\partial T}{\partial x_k} + \left(\rho E + \rho \frac{v^2}{2}\right) v_k - \sigma_{ik} v_k. \tag{9,9}$$

Подставляя $j_E^{(k)}$ из (9,9) в (9,6) получаем

$$\frac{\partial \rho E}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x_k} (\rho E v_k) + \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\varkappa \frac{\partial T}{\partial x_k}\right) + \sigma_{ik} \frac{\partial v_i}{\partial x_k}. \tag{9,10}$$

Так же как и кинетическая энергия, внутренняя энергия жидкости не сохраняется. Закон сохранения выполняется только для их суммы, т. е. для полной энергии.

Последнюю формулу удобно представить в другом виде. Именно, можно написать

$$\rho \frac{dE}{dt} = \frac{\partial}{\partial t} (\rho E) + \operatorname{div} \rho E \boldsymbol{v}. \tag{9,11}$$

Кроме того, определим количество тепла в единице объема соотношением

$$\rho \frac{dQ}{dt} = -\operatorname{div} j_T. \tag{9,12}$$

Выделяя в тензоре напряжений $\sigma_{ik}$ член с давлением, написав

$$\sigma_{ik} = \sigma'_{ik} - p\delta_{ik}, \tag{9,13}$$

имеем

$$\rho \frac{dE}{\partial t} = \rho \frac{dQ}{dt} - p \frac{\partial v_k}{\partial x_k} + \sigma'_{ik} \frac{\partial v_i}{\partial x_k}.$$

Разделив все уравнения на $\rho$, получаем

$$\frac{dE}{dt} = \frac{dQ}{\partial t} - \frac{p}{\rho} \frac{\partial v_k}{\partial x_k} + \frac{\sigma_{ik}}{\rho} \frac{\partial v_i}{\partial x_k}. \tag{9,14}$$

Уравнение непрерывности дает

$$\frac{d\rho}{dt} = \frac{\partial \rho}{\partial t} + \rho \frac{\partial v_k}{\partial x_k} = -\rho \frac{\partial v_k}{\partial x_k}, \tag{9,15}$$

Поэтому окончательно

$$\frac{dE}{dt} = \frac{dQ}{dt} + \frac{p}{\rho^2} \frac{d\rho}{dt} + \frac{\sigma'_{ik}}{\rho} \frac{\partial v_i}{\partial x_k}. \tag{9,16}$$

Как мы подчеркивали в § 1, мы приняли допущение о существовании локального равновесия в движущейся среде. Поэтому связь между термодинамическими функциями, в частности, между внутренней энергией и энтропией, дается формулами термодинамики.

Запишем основное термодинамическое равенство в виде

$$\frac{dE}{dt}=T\frac{dS}{dt}+\frac{p}{\rho^2}\frac{d\rho}{dt}+\sum\mu_\alpha\frac{dc_\alpha}{dt} \tag{9,17}$$

и исключим из (9,17) и (9,16) внутреннюю энергию. Тогда мы приходим к уравнению для баланса энтропии:

$$T\frac{dS}{dt}=\frac{dQ}{dt}+\frac{\sigma'_{ik}}{\rho}\frac{\partial v_i}{\partial x_k}-\sum\mu_\alpha\frac{dc_\alpha}{dt} \tag{9,18}$$

или, пользуясь (7,8) и (9,12) и расписывая полную производную энтропии, находим

$$\rho\left(\frac{\partial S}{\partial t}+v_k\frac{\partial S}{\partial x_k}\right)=-\frac{1}{T}\frac{\partial j_T^{(k)}}{\partial x_k}+\frac{\sigma'_{ik}}{T}\frac{\partial v_i}{\partial x_k}+\sum\frac{\partial j_{D,\alpha}^{(k)}}{\partial x_k}\frac{\mu_\alpha}{T}. \tag{9,19}$$

Это уравнение удобно записать в виде

$$\rho\left(\frac{\partial S}{\partial t}+\boldsymbol{v}\,\mathrm{grad}\,S\right)=-\mathrm{div}\frac{\boldsymbol{j}_T-\sum\mu_\alpha\boldsymbol{j}_{D,\alpha}}{T}+\boldsymbol{j}_T\,\mathrm{grad}\frac{1}{T}-$$
$$-\frac{1}{T}\sum_\alpha\mathbf{j}_{D,\alpha}\left(T\,\mathrm{grad}\frac{\mu_\alpha}{T}\right)+\frac{\sigma'_{ik}}{T}\frac{\partial v_i}{\partial x_k} \tag{9,20}$$

или, введя вектор плотности потока энтропии $\boldsymbol{j}_S$, определенный равенством

$$\boldsymbol{j}_S=\frac{1}{T}\left(\boldsymbol{j}_T-\sum\boldsymbol{j}_{D,\alpha}\mu_\alpha\right) \tag{9,21}$$

и обозначив через $\Sigma$ величину

$$\sum=\boldsymbol{j}_T\,\mathrm{grad}\frac{1}{T}-\frac{1}{T}\sum_\alpha\boldsymbol{j}_{D,\alpha}\left(T\,\mathrm{grad}\frac{\mu_\alpha}{T}\right)+\frac{\sigma'_{ik}}{T}\frac{\partial v_i}{\partial x_k}, \tag{9,22}$$

представим (9,20) в виде

$$\rho\left(\frac{\partial S}{\partial t}+\boldsymbol{v}\,\mathrm{grad}\,S\right)=-\mathrm{div}\,\boldsymbol{j}_S+\sum \tag{9,23}$$

или в виде

$$\frac{\partial\rho S}{\partial t}=-\mathrm{div}\,(\rho S\boldsymbol{v}+\boldsymbol{j}_S)+\sum. \tag{9,24}$$

Уравнение (9,20) показывает, что энтропия не сохраняется: изменение энтропии в данном объеме в единицу времени связано не только с ее уходом вместе с движущейся средой, путем

теплопроводности и молекулярной диффузии, но так же возникновением со скоростью, определяемой величиной $\Sigma$. Эта величина носит название производства энтропии.

В несжимаемой жидкости последний член в производстве энтропии согласно (9,4) связан с вязкой диссипацией. В сжимаемых жидкостях он имеет тот же смысл, но связан как с первой, так и со второй вязкостью[1]).

В однокомпонентной системе диффузионный поток отсутствует, $j_D = 0$ и соответствующие слагаемые в (9,21) и (9,22) обращаются в нуль. В однокомпонентной несжимаемой жидкости (9,23) можно представить в виде уравнения для температуры.

Здесь уместно напомнить, что под несжимаемой жидкостью мы понимаем жидкость, совершающую медленное (по сравнению со скоростью звука) движение. При таком движении плотность среды не зависит от координат и времени явно. В неизотермических условиях она может, однако, зависеть от температуры и, следовательно, изменяться во времени и в пространстве. Тем не менее уравнение непрерывности в неизотермической несжимаемой жидкости определяется формулой (7,4).

Энтропию жидкости можно представить как функцию температуры и давления. Выразим производные от энтропии по координатам и времени через производные температуры. Для этого напишем основные равенства

$$\frac{\partial S}{\partial t} = \left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_p \frac{\partial T}{\partial t} = T\left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_p \frac{1}{T}\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{C_p}{T}\frac{\partial T}{\partial t},$$

$$\frac{\partial S}{\partial x_i} = \left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_p \frac{\partial T}{\partial x_i} = \frac{C_p}{T}\frac{\partial T}{\partial x_i},$$

$$j_T = -\varkappa \operatorname{grad} T, \qquad j_D = 0,$$

$$\frac{\sigma'_{ik}}{T}\left(\frac{\partial v_i}{\partial x_k} + \frac{\partial v_k}{\partial x_i}\right)^2 = \frac{\eta}{2T}\left(\frac{\partial v_i}{\partial x_k} + \frac{\partial v_k}{\partial x_i}\right)^2.$$

Подставляя эти равенства в (9,20), без труда получаем

$$\rho C_p\left(\frac{\partial T}{\partial t} + v \operatorname{grad} T\right) = \operatorname{div}(\varkappa \operatorname{grad} T) + \frac{\eta}{2}\left(\frac{\partial v_i}{\partial x_k} + \frac{\partial v_k}{\partial x_i}\right)^2. \quad (9{,}25)$$

Это уравнение представляет уравнение теплопроводности в движущейся среде.

Часто в уравнении теплопроводности можно сделать дальнейшие упрощения. Хотя кинетические коэффициенты $\varkappa$ и $\eta$ являются функциями температуры, при малых изменениях температуры этой зависимостью можно пренебречь. При этом

---

[1]) См. Л. Д. Ландау и Е. М. Лифшиц, Механика сплошных сред, Гостехиздат, 1953, стр. 229.

кинетические коэффициенты в однородной системе оказываются постоянными во всех ее точках и их можно вынести за знак производной. Кроме того, при малых скоростях движения последнее слагаемое обычно (хотя и не всегда!) мало́ и его можно опустить. Уравнение теплопроводности приобретает вид

$$\frac{\partial T}{\partial t} + v \operatorname{grad} T = \chi \Delta T, \qquad (9,26)$$

где $\chi = \varkappa/\rho C_p$ именуется температуропроводностью.

Мы получили систему уравнений переноса в движущихся сплошных средах. Совокупность уравнений переноса массы, уравнений движения и уравнения энергии (или энтропии) образуют полную систему, описывающую движение среды. Действительно, уравнения движения содержат пять переменных величин ($\boldsymbol{v}$, $\rho$, $p$) в однокомпонентной жидкости. Уравнение энтропии вводит еще две неизвестные функции — $S$ и $T$. Для определения семи функций имеются три уравнения, уравнение непрерывности, уравнение энтропии и термодинамические соотношения $S = S(T, p)$ и уравнение состояния $p = p(T, \rho)$. Вся совокупность уравнений содержит три кинетических коэффициента — $\eta$, $\zeta$ и $\varkappa$.

Мы не будем останавливаться ни на граничных условиях, которыми должны быть дополнены эти уравнения, чтобы их решения стали однозначными, ни на проведении этих решений даже в самых простых случаях. Все эти вопросы излагаются в курсах механики сплошных сред (или гидроаэродинамики).

Наша цель заключалась лишь в том, чтобы сформулировать в известных допущениях макроскопические (феноменологические) уравнения неравновесной сплошной среды. Ниже будет показано, что как сами макроскопические уравнения, так и входящие в них кинетические коэффициенты могут быть получены из кинетических соображений, на основе молекулярных представлений, по крайней мере для простейших систем.

## § 10. Уравнение Фоккера — Планка

Мы можем теперь перейти к кинетическому описанию макроскопических систем.

Прежде всего сформулируем теорию медленных процессов, имеющую весьма общий, но несколько формальный характер.

Рассмотрим произвольную макроскопическую систему, находящуюся в состоянии неполного равновесия. Мы будем следить за изменениями ее состояний в течение промежутка времени $T_0$, удовлетворяющего неравенству

$$\tau_q \ll T_0 \ll \tau_s, \qquad (10,1)$$

где $\tau_q$ и $\tau_s$ — времена релаксации для быстрых и медленных процессов в системе.

Состояниям неполного равновесия отвечают возможность задания различных микроскопически определенных характеристик системы. Микроскопическое состояние системы будет характеризоваться некоторыми параметрами, всю совокупность которых мы будем обозначать через $\lambda$. Величина $\lambda$ будет считаться пробегающей непрерывный ряд значений. Статистическое описание поведения системы будет осуществляться заданием функции распределения вероятностей $\rho(\lambda, t)\,d\lambda$, характеризующей вероятность того, что система находится в момент времени $t$ в состоянии в интервале $\lambda$, $\lambda + d\lambda$. Функцию распределения будем считать нормированной на единицу $\int \rho(\lambda, t)\,d\lambda = 1$. Пусть в некоторый момент времени $t_0$ система с вероятностью $\rho(\lambda_0, t_0)\,d\lambda$ находится в состоянии $\lambda_0$. За время $\Delta t \ll T_0$ состояние системы изменится и она в момент времени $t' = t_0 + \Delta t$ с вероятностью $\rho(\lambda, t_0 + \Delta t)\,d\lambda$ будет находиться в состоянии $\lambda$.

В основу дальнейших рассуждений будет положено следующее допущение: вероятность попадания в состояние $\lambda$ за время $\Delta t$ полностью определена заданием состояния $\lambda$ и не зависит от того, каким образом система попала в состояние $\lambda_0$, т. е. не зависит от предыстории процесса. Таким образом, вероятность перехода из одного произвольного состояния в другое зависит только от этой пары состояний. Такие состояния в теории вероятностей названы состояниями, образующими цепь Маркова. Поэтому кратко наше допущение можно сформулировать как допущение о том, что переходы между состояниями системы за время $\Delta t$ образуют цепь Маркова. Вероятность перехода $w$ в этом случае можно записать в виде $w(\lambda_0, \lambda, \Delta t)$. Если бы переходы не имели характер цепей Маркова, то $w$ зависело бы от состояний системы $\lambda_k$, в которой она находилась при $t'$, и переходов, в результате которых система попала в состояние $\lambda_0$.

Вероятность $w(\lambda_0, \lambda, \Delta t)$ будем считать нормированной на единицу

$$\int w(\lambda_0, \lambda, \Delta t)\,d\lambda = 1. \qquad (10,2)$$

Допустим, наконец, что вероятность перехода $\lambda_0 \to \lambda$ быстро убывает с ростом разности $|\lambda - \lambda_0|$. Это означает, что переходы с существенным изменением состояния системы являются мало вероятными. С заметной вероятностью происходят переходы, при которых состояние системы изменяется сравнительно мало. Иными словами, мы предполагаем, что в системе происходят медленные процессы. Количественные ограничения, накладываемые этим допущением на свойства $w(\lambda_0, \lambda, \Delta t)$, будут даны ниже.

На основе этих допущений можно найти весьма общее уравнение, определяющее зависимость функции распределения от

параметров $\lambda$ и времени. Заметим прежде всего, что вероятность $\rho(\lambda, t_0+\Delta t)d\lambda$ можно представить как

$$\rho(\lambda, t_0+\Delta t)\,d\lambda = d\lambda \int \rho(\lambda_0, t_0)\, w(\lambda_0, \lambda, \Delta t)\, d\lambda_0, \qquad (10,3)$$

где интегрирование ведется по всем возможным значениям переменной $\lambda_0$. Действительно, $\rho(\lambda_0, t_0)\,w(\lambda_0, \lambda, \Delta t)\,d\lambda_0 d\lambda$ представляет вероятность того, что система, находившаяся в состоянии $\lambda_0$ за время $\Delta t$ перейдет в состояние $\lambda$. Полная вероятность того, что система будет в момент $t_0+\Delta t$ в состоянии $\lambda$, получается суммированием по всем возможным состояниям $\lambda_0$.

Интегральное уравнение (10,3) носит название уравнения Смолуховского. При его выводе мы использовали только допущение, что состояния системы образуют цепь Маркова. Теперь мы воспользуемся допущением о медленности процесса. Умножим обе части (10,3) на произвольную функцию $\varphi(\lambda)/\Delta t$, относительно которой предполагается лишь, что она непрерывна и $\varphi \to 0$ при $|\lambda| \to \infty$, и проинтегрируем по всем $\lambda$. Тогда

$$\frac{1}{\Delta t}\int \rho(\lambda, t_0+\Delta t)\,\varphi(\lambda)\,d\lambda = \frac{1}{\Delta t}\int \rho(\lambda_0, t)\,d\lambda_0 \int w(\lambda_0, \lambda, \Delta t)\,\varphi(\lambda)\,d\lambda. \qquad (10,4)$$

Разложим, далее, функцию $\varphi(\lambda)$ в ряд по степеням $(\lambda-\lambda_0)$:

$$\varphi(\lambda) = \varphi(\lambda_0) + \varphi'(\lambda_0)(\lambda-\lambda_0) + \frac{\varphi''(\lambda_0)}{2}(\lambda-\lambda_0)^2 + \ldots$$

Подставим это разложение в правую часть (10,4). Тогда

$$\int \rho(\lambda_0, t)\,d\lambda_0 \cdot \int \Big[\varphi(\lambda_0) + \varphi'(\lambda_0)(\lambda-\lambda_0) + \frac{\varphi''(\lambda_0)}{2}(\lambda-\lambda_0)^2\Big] w(\lambda_0, \lambda, \Delta t)\,d\lambda =$$
$$= \int \rho(\lambda_0, t)\,\varphi(\lambda_0)\,d\lambda_0 \int w(\lambda_0, \lambda, \Delta t)\,d\lambda + \int \rho(\lambda_0, t)\,\varphi'(\lambda_0)\,d\lambda_0 \int (\lambda-\lambda_0)\,w(\lambda_0, \lambda, \Delta t)\,d\lambda +$$
$$+ \frac{1}{2}\int \rho(\lambda_0, t)\,\psi''(\lambda_0)\,d\lambda_0 \int (\lambda-\lambda_0)^2\,w(\lambda_0, \lambda, \Delta t)\,d\lambda + \ldots$$

Рассмотрим внутренние интегралы по переменной $\lambda$. Первый из них согласно (10,2) равен единице.

В силу быстрого спадания $w$ при увеличении $(\lambda-\lambda_0)$, интегралы существуют и хорошо сходятся. При этом ясно, что при таком поведении $w$ последовательные значения интегралов

$$I_n = \int (\lambda-\lambda_0)^n\, w\, d\lambda$$

быстро уменьшаются с увеличением $n$. Мы ограничимся членами

второго порядка малости. Тогда найдем

$$\int \rho(\lambda_0, t)\, d\lambda_0 \int \varphi(\lambda)\, w(\lambda_0, \lambda, \Delta t)\, d\lambda \simeq \int \rho(\lambda_0, t)\, \varphi(\lambda_0)\, d\lambda_0 + \\ + \int \rho(\lambda_0, t)\, \varphi'(\lambda_0)\, I_1(\lambda_0, \Delta t)\, d\lambda_0 + \\ + \frac{1}{2} \int \rho(\lambda_0, t)\, \varphi''(\lambda_0)\, I_2(\lambda_0, \Delta t) \cdot d\lambda_0,$$

откуда

$$\frac{1}{\Delta t} \int \rho(\lambda, t + \Delta t)\, \varphi(\lambda)\, d\lambda = \frac{1}{\Delta t} \int \rho(\lambda_0, t)\, \varphi(\lambda_0)\, d\lambda_0 + \\ + \frac{1}{\Delta t} \int \rho(\lambda_0, t)\, \varphi'(\lambda_0)\, I_1(\lambda_0, \Delta t)\, d\lambda_0 + \\ + \frac{1}{2\,\Delta t} \int \rho(\lambda_0, t)\, \varphi''(\lambda_0)\, I_2(\lambda_0, \Delta t)\, d\lambda. \quad (10,5)$$

Переобозначив в первом интеграле справа переменную интегрирования $\lambda_0 \to \lambda$, перенеся его в левую часть и переходя к пределу $\Delta t \to 0$, находим

$$\lim_{\Delta t \to 0} \int \frac{\rho(\lambda, t + \Delta t) - \rho(\lambda, t)}{\Delta t}\, \varphi(\lambda)\, d\lambda = \\ = \int \rho(\lambda_0, t)\, \varphi'(\lambda_0) \left( \lim_{\Delta t \to 0} \frac{I_1(\lambda_0, \Delta t)}{\Delta t} \right) d\lambda_0 + \\ + \frac{1}{2} \int \rho(\lambda_0, t)\, \varphi''(\lambda_0) \left( \lim_{\Delta t \to 0} \frac{I_2(\lambda_0, \Delta t)}{\Delta t} \right) d\lambda_0$$

или, вводя обозначения

$$\lim_{\Delta t \to 0} \frac{I_1(\lambda_0, \Delta t)}{\Delta t} = \lim_{\Delta t \to 0} \int \frac{(\lambda - \lambda_0)}{\Delta t}\, w(\lambda_0, \lambda, \Delta t)\, d\lambda = a(\lambda_0), \quad (10,6)$$

$$\lim_{\Delta t \to 0} \frac{I_2(\lambda_0, \Delta t)}{2\,\Delta t} = \frac{1}{2} \lim_{\Delta t \to 0} \int \frac{(\lambda - \lambda_0)^2}{\Delta t}\, w(\lambda_0, \lambda, \Delta t)\, d\lambda_0 = D(\lambda_0), \quad (10,7)$$

имеем, заменяя $\lambda_0 \to \lambda$ в правой части:

$$\int \frac{\partial \rho(\lambda, t)}{\partial t}\, \varphi(\lambda)\, d\lambda = \int a(\lambda)\, \varphi'(\lambda)\, \rho(\lambda, t)\, d\lambda + \int D(\lambda)\, \varphi''(\lambda)\, \rho(\lambda, t)\, d\lambda. \quad (10,8)$$

Интегрируя по частям оба слагаемых в правой части и пользуясь свойствами функции $\varphi(\lambda)$, получаем

$$\int a(\lambda)\, \varphi'(\lambda)\, \rho(\lambda, t)\, d\lambda = \varphi(\lambda)\, \rho(\lambda)\, a(\lambda) \Big|_{-\infty}^{\infty} - \int \varphi(\lambda) \frac{\partial}{\partial \lambda}(a\rho)\, d\lambda = \\ = - \int \varphi(\lambda) \frac{\partial}{\partial \lambda}(a\rho)\, d\lambda,$$

$$\int D(\lambda)\, \varphi''(\lambda)\, \rho(\lambda, t)\, d\lambda = \int \varphi(\lambda) \frac{\partial^2}{\partial \lambda^2}(D\rho)\, d\lambda.$$

Подставляя эти выражения в (10,8) и перенося все слагаемые в левую сторону, находим

$$\int \varphi(\lambda)\left[\frac{\partial\rho}{\partial t}+\frac{\partial}{\partial\lambda}(a\rho)-\frac{\partial^2}{\partial\lambda^2}(D\rho)\right]d\lambda=0.$$

Ввиду произвольности $\varphi(\lambda)$ окончательно получаем

$$\frac{\partial\rho}{\partial t}=-\frac{\partial}{\partial\lambda}\left[a\rho-\frac{\partial}{\partial\lambda}D\rho\right]=-\frac{\partial j}{\partial\lambda}. \tag{10,9}$$

Уравнение (10,9) носит название уравнения Фоккера — Планка. Оно определяет зависимость плотности вероятности от времени и совокупности параметров $\lambda$ в случае произвольного медленного процесса. Для краткости записи мы не учитывали, что величин $\lambda$ может быть произвольное множество.

В этом случае, не повторяя выкладок, можно написать

$$\frac{\partial\rho}{\partial t}=-\frac{\partial}{\partial\lambda_i}\left\{a_i\rho-\frac{\partial}{\partial\lambda_k}(D_{ik}\rho)\right\}=-\frac{\partial j_i}{\partial\lambda_i}, \tag{10,10}$$

где суммирование ведется по всем значениям $i$ и $k$. При этом коэффициенты $a_i$ и $D_{ik}$ имеют вид

$$a_i=\lim_{\Delta t\to 0}\int\frac{(\lambda_i-\lambda_{0i})}{\Delta t}\,w(\lambda_{0i},\ \lambda_i,\ \Delta t)\,d\lambda_i,$$

$$D_{ik}=\lim_{\Delta t\to 0}\int\frac{(\lambda_i-\lambda_{0i})(\lambda_k-\lambda_{0k})}{\Delta t}\,w(\lambda_{0k},\ \lambda_k,\ \Delta t)\cdot d\lambda_i.$$

Уравнению Фоккера — Планка можно придать наглядный смысл, если рассмотреть множество изобразительных точек, отвечающее некоторому ансамблю тождественных неравновесных систем. Величину $\rho(\lambda, t)$ можно считать при этом плотностью изобразительных точек. Тогда вектор

$$j_i=a_i\rho-\frac{\partial}{\partial\lambda_k}(D_{ik}\rho) \tag{10,11}$$

можно интерпретировать как поток изобразительных точек в фазовом пространстве. При этом уравнение Фоккера — Планка выражает закон сохранения числа изобразительных точек.

Умножая (10,10) на $\lambda$ и интегрируя, находим

$$\int\lambda_i\frac{\partial\rho}{\partial t}d\lambda_i=\frac{\partial}{\partial t}\bar{\lambda}_i-\int\dot{\lambda}_i\rho\,d\lambda_i=$$

$$=-\bar{\dot{\lambda}}_i=-\int\lambda_i\frac{\partial}{\partial\lambda_i}\left\{a_i\rho-\frac{\partial}{\partial\lambda_k}(D_{ik}\rho)\right\}d\lambda_i;$$

отсюда, полагая, что $\rho\to 0$ при $\lambda\to\pm\infty$, имеем

$$\bar{\dot{\lambda}}_i=\int a_i\rho\,d\lambda.$$

Вектор $a_i$ носит название подвижности. Он представляет собой среднюю скорость движения изобразительных точек в фазовом пространстве.

Второе слагаемое в $j_i$ не дает вклада в среднюю скорость и представляет диффузионный поток. Тензор $D_{ik}$ представляет тензор обобщенных коэффициентов диффузии. Часто $j_i$ представляют в виде

$$j_i = a'_i\rho - D_{ik}\frac{\partial \rho_i}{\partial \lambda_k}. \qquad (10,12)$$

Тогда уравнение Фоккера — Планка приобретает вид

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial \lambda_i}\left(a'_i\rho - D_{ik}\frac{\partial \rho}{\partial \lambda_k}\right). \qquad (10.13)$$

Это — так называемая вторая форма уравнения Фоккера — Планка.

В частности, если тензор $D_{ik}$ коэффициентов диффузии и вектор подвижности не зависят от переменных $\lambda$, выражение для потока представляет непосредственное обобщение эмпирических законов (7,10) и (9,8):

$$j_i = a_i\rho - D\frac{\partial \rho}{\partial \lambda_i},$$

где $D$ — обобщенный коэффициент диффузии. При этом уравнение Фоккера — Планка переходит в более простое уравнение

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -a\frac{\partial \rho}{\partial \lambda} + D\frac{\partial^2 \rho}{\partial \lambda^2} = 0.$$

В стационарном состоянии в одномерном случае уравнение Фоккера — Планка легко интегрируется:

$$\frac{\partial}{\partial \lambda}\left(a\rho - \frac{\partial}{\partial \lambda}(D\rho)\right).$$

Если поток частиц на бесконечности отсутствует, то интегрирование дает

$$\frac{\partial D\rho}{\partial \lambda} = a\rho,$$

откуда

$$\rho(\lambda) = \frac{\text{const}}{D}\exp\left[\int_0^{\lambda}\frac{a(\lambda')}{D(\lambda')}d\lambda'\right].$$

Рассмотрим теперь случай броуновской диффузии частицы, происходящей во внешнем поле сил. Благодаря действию внешней силы вероятность перехода $w(x_0, x, \Delta t)$ уже не симметрична относительно смещений частицы по направлению силы и в противоположном направлении. Поэтому средняя скорость $\bar{v} \neq 0$ и уравнение Фоккера — Планка можно написать в виде

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x}(\bar{v}\rho) + D\frac{\partial^2 \rho}{\partial x^2} = -\frac{\partial j}{\partial x}. \qquad (10,13')$$

Поток вероятности $j$ слагается из диффузионного потока и потока, обусловленного действием силы $f$. Обычно средняя скорость, приобретаемая частицей, может быть написана в виде $\bar{v} = bf$ (ср. § 56 ч. III). Тогда получаем обобщенное уравнение диффузии:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x}\left(D\frac{\partial \rho}{\partial x} - bf\rho\right). \tag{10,14}$$

В равновесном состоянии (10,14) дает $bf\rho - D\frac{\partial \rho}{\partial x} = 0$. В поле потенциальных сил $b\frac{\partial U}{\partial x}\rho + D\frac{\partial \rho}{\partial x} = 0$, или

$$\rho = \mathrm{const}\, e^{-\frac{bU}{D}x}. \tag{10,15}$$

Для того чтобы (10,15) совпадало с распределением Больцмана, должно выполняться соотношение Эйнштейна для связи между коэффициентом диффузии и подвижностью

$$\frac{b}{D} = \frac{1}{kT}.$$

Поэтому (10,14) можно представить в виде

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \frac{D}{kT}\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial U}{\partial x}\rho + kT\frac{\partial \rho}{\partial x}\right) = -\frac{\partial j}{\partial x},$$

где

$$j = -D\frac{\partial \rho}{\partial x} - \frac{D}{kT}\frac{\partial U}{\partial x}\rho. \tag{10,14'}$$

В стационарном, но неравновесном состоянии $j \neq 0$.

Заметим, что в § 56 ч. III мы пришли уже фактически к формуле (10,14), исходя из наглядного рассмотрения процесса смещения броуновской частицы.

Интегрирование (10,13') дает для распределения вероятностей

$$\rho(x, t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}}\exp\left\{-\frac{(x+vt)^2}{4Dt}\right\}dx,$$

т. е. распределение Гаусса, центр которого смещается со скоростью $v$.

В качестве другого примера рассмотрим термическое прохождение частиц через потенциальный барьер. Пусть система невзаимодействующих частиц находится в области минимума потенциальной энергии (в потенциальной яме). Выберем за начало отсчета дно ямы и положим вблизи дна ямы

$$U \simeq \frac{k_1 x^2}{2}.$$

Частицы в потенциальной яме находятся в состоянии статистического равновесия, так что

$$n\,dx = w(0)\,e^{-\frac{U}{kT}}\,dx.$$

Вблизи точки минимума можно написать

$$n\,dx = w(0)\,e^{-\frac{U}{kT}}\,dx \approx w(0)\,e^{-\frac{k_1x^2}{2kT}}\,dx,$$

где $w(0)$ — вероятность найти частицу в точке $x = 0$.

Полное число частиц в яме

$$N = w(0)\int\limits_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{k_1x^2}{2kT}}\,dx = w(0)\sqrt{\frac{2\pi kT}{k_1}}.$$

Мы распространили пределы интегрирования на интервал $(-\infty, \infty)$ ввиду быстрого спадания подынтегральной функции.

Пусть в области $x \sim 1$ потенциальная яма граничит с потенциальным барьером, вершина которого находится в точке $x = 1$. Будем считать, что высота барьера $U_0$ удовлетворяет неравенству

$$U_0 \gg kT. \tag{10,16}$$

За потенциальным барьером частицы вновь попадают в потенциальную яму. Если высота барьера удовлетворяет неравенству (10,16), то число частиц, протекающих через барьер, весьма мало́. Тепловая диффузия через барьер является при этом настолько медленным процессом, что его можно считать стационарным.

Пользуясь (10,14′), находим для потока $j$

$$j = \frac{kT}{D}\,\frac{w(0)\left(e^{-\frac{U}{kT}}\right)}{\int e^{\frac{U}{kT}}\,dx}\Bigg|_0^{\infty} = \frac{kT}{D}\,\frac{w(0)\left(1 - e^{-\frac{\Delta U}{kT}}\right)}{\int e^{\frac{U}{kT}}\,dx},$$

где $(-\Delta U)$ — разность энергий между двумя ямами.

Вблизи максимума потенциальную энергию можно представить в виде

$$U = U_0 - \frac{k_2}{2}(x - x_{\max})^2.$$

Ввиду быстрого убывания подынтегрального выражения, можно распространить интегрирование на всю ось $x$-в. Тогда находим

$$\int e^{\frac{U}{kT}}\,dx = e^{\frac{U_0}{kT}}\int\limits_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{k_2x^2}{2kT}}\,dx = e^{\frac{U_0}{kT}}\sqrt{\frac{2\pi kT}{k_2}}.$$

Соответственно,

$$j = \frac{kTw(0)}{D}\sqrt{\frac{k_2}{2\pi kT}}\, e^{-\frac{U_0}{kT}}\left(1 - e^{\frac{\Delta U}{kT}}\right). \qquad (10{,}17)$$

Разделив $j$ на полное число частиц в точке $x = 0$, находим вероятность того, что частица, находившаяся первоначально в одной потенциальной яме, пройдет через барьер и попадет в другую яму:

$$P = \frac{j}{N} = \frac{\sqrt{k_1 k_2}}{2\pi D}\, e^{-\frac{U_0}{kT}}\left(1 - e^{\frac{\Delta U}{kT}}\right). \qquad (10{,}18)$$

Формула (10,18) применяется для расчета скоростей химических реакций. В этом случае $\Delta U$ представляет разность между энергиями исходных и конечных продуктов.

Мы в дальнейшем будем неоднократно иметь дело с медленными процессами и увидим, что их поведение описывается уравнениями типа Фоккера — Планка.

Вследствие своей общности, уравнение Фоккера — Планка не дает детальных сведений о поведении систем частиц. Оно имеет квазимакроскопический характер и содержит неизвестные коэффициенты, значение которых должно определяться на опыте или находиться на основе кинетического описания макроскопических систем.

## § 11. Основное кинетическое уравнение

Эволюция произвольной квазизамкнутой подсистемы определяется уравнением (2,3) для матрицы плотности. Получить его точное решение невозможно. Поэтому вместо точного уравнения для матрицы плотности в физической кинетике широко используется так называемое основное кинетическое уравнение, к выводу которого мы перейдем.

Рассмотрим замкнутую систему, состоящую из большого числа $N$ взаимодействующих частиц. Будем считать, что взаимодействие между частицами во время $-\infty < t \leqslant 0$ отсутствовало и включено в момент $t = 0$.

Волновая функция системы при $t = 0$ может быть представлена разложением

$$\Psi_0 = \sum c_m(0)\,\psi_m,$$

где $\psi_m$ — система собственных функций некоторых операторов, описывающих систему частиц.

Взаимодействие между частицами приводит к изменению состояния системы и ее волновая функция изменяется во времени $\Psi_0 \to \Psi(t)$. Волновая функция $\Psi(t)$ снова может быть

разложена по функциям

$$\Psi(t) = \sum c_i(t)\,\psi_i.$$

Будем считать взаимодействием слабым и воспользуемся теорией нестационарных возмущений.

Вероятность того, что в момент времени $t$ система окажется в некотором $i$-м состоянии, дается величиной $|c_i(t)|^2$.

Согласно (55,10) ч. V

$$c_i(t) = c_i^{(0)} + c_i^{(1)} + \ldots, \tag{11,1}$$

где

$$c_i^{(0)} = c_i(0); \quad |c_i^{(1)}(t)| = \left| \sum H'_{ik} c_k^{(0)} \frac{1 - e^{i/\hbar\,(\varepsilon_k - \varepsilon_i)\,t}}{2(\varepsilon_i - \varepsilon_k)} \right|,$$

а $H'_{ik}$ — матричный элемент оператора взаимодействия $\hat{H}'$ по волновым функциям $\psi_i$.

Перейдем теперь от квантовомеханического описания системы к статистическому. Для этого, как это было пояснено в § 2, заменим значения $|c_i(t)|^2$ их средним по времени значением $\overline{|c_i(t)|^2}$. При этом мы примем гипотезу случайных фаз (2,7). При усреднении суммы (11,1) все произведения $c_i^{(0)} c_k^{(1)}$ и $c_k^{(1)} c_{k'}^{(1)}$ обратятся в нуль. Тогда мы получим

$$\overline{|c_i^{(1)}(t)|^2} = |c_i^{(0)}|^2 + \sum |H'_{ik}|^2 |c_k^{(0)}|^2 D(t), \tag{11,2}$$

где

$$D(t) = 2\frac{1 - \cos\dfrac{(\varepsilon_i - \varepsilon_k)t}{\hbar}}{(\varepsilon_i - \varepsilon_k)^2}. \tag{11,3}$$

Формула (11,2) определяет вероятность перехода частиц из $k$-го состояния в $i$-е за время $t$. Число частиц в $k$-м состоянии пропорционально $|c_k|^2$, поэтому

$$\Delta N_i^+ = \sum |H'_{ik}|^2 N_k D(t).$$

Здесь $\Delta N_i^+$ — изменение числа частиц в $i$-м состоянии, связанное с приходом в него частиц из $k$-х состояний.

Баланс частиц в $i$-м состоянии можно написать в виде

$$\Delta N_i = \Delta N_i^+ - \Delta N_i^- = \sum |H'_{ik}|^2 N_k(0) D(t) - \\ - \sum |H'_{ki}|^2 N_i(0) D(t) = \sum |H'_{ik}|^2 (N_k(0) - N_i(0))\, D(t). \tag{11,4}$$

Первое слагаемое представляет число частиц, приходящих в $i$-е состояние за время $t$, второе — число частиц, уходящих из него за это же время. Множитель $D(t)$, как мы видели в § 56 ч. V,

при $t \to \infty$ является одним из представлений $\delta$-функции:

$$D(t) \to \frac{\pi}{2\hbar} t\delta(\varepsilon_i - \varepsilon_k). \tag{11,5}$$

Полагая, что время $t$ достаточно велико для того, чтобы можно было воспользоваться формулой (11,5) и весьма мало́ с макроскопической точки зрения, мы можем написать:

$$\Delta N_i = \frac{\pi}{2\hbar} t \sum |H'_{ik}|^2 (N_k - N_i)\,\delta(\varepsilon_i - \varepsilon_k), \tag{11,6}$$

или, поскольку $N_i$ — микроскопически определенная величина, можно заменить $\Delta N_i/t$ на производную и написать окончательно так:

$$\frac{dN_i}{dt} = \sum W_{ik}(N_k - N_i), \tag{11,7}$$

где через $W_{ik}$ обозначена вероятность перехода из $k$-го в $i$-е состояние

$$W_{ik} = \frac{2}{\pi\hbar} |H'_{ik}|^2 \delta(\varepsilon_i - \varepsilon_k). \tag{11,8}$$

Уравнение (11,7) носит название основного кинетического уравнения. Оно играет важнейшую роль в физической кинетике. Его можно переписать в эквивалентной форме, введя вместо числа частиц вероятность заполнения данного состояния $w_i$. Тогда имеем

$$\frac{dw_i}{dt} = \sum W_{ik}(w_k - w_i). \tag{11,9}$$

Подчеркнем, прежде всего, в чем состоит отличие кинетического уравнения (11,7) от точного уравнения для матрицы плотности (2,4). Кинетическое уравнение содержит только вероятность заполнения $w_i$, но не амплитуды вероятности. Иными словами, оно содержит только диагональные элементы матрицы плотности $\rho_{nn}$.

Мы привели этот вывод, в значительной мере повторяющий вывод формулы (56,11) ч. V, для того, чтобы были ясны сделанные предположения и границы применимости основного кинетического уравнения.

Мы начнем с обсуждения области применимости формулы (11,5). Переход к $\delta$-функции осуществим, если интервал значений $\Delta\varepsilon = \varepsilon_i - \varepsilon_k$ при всех $i$ и $k$ удовлетворяет условию

$$\Delta\varepsilon \cdot t \sim \hbar.$$

В макросистеме $\Delta\varepsilon < kT$, так что

$$t > \frac{\hbar}{kT}. \tag{11,10}$$

Как мы уже подчеркивали в квантовой механике, законы квантовой механики обратимы и не изменяются при замене $t \to (-t)$. Это находит свое отражение в симметрии вероятностей переходов или принципе детального равновесия:

$$W_{ik} = W_{ki}. \tag{11,11}$$

Мы видели в квантовой механике (см. § 98 ч. V), что принцип детального равновесия не связан с применением теории возмущений и конкретным видом $\hat{H}'$ в формуле (11,9), но имеет совершенно общий характер.

Необратимость процессов в кинетике возникает при выполнении усреднения коэффициентов $|c_i(t)|^2$ по времени. Это усреднение основывается на гипотезе случайных фаз, которая лежит в основе приведенного вывода кинетического уравнения.

Гипотеза случайных фаз использована не только для начального состояния системы, но и для всех остальных состояний. По существу, картина эволюции, описываемая кинетическим уравнением (11,7), сводится к следующему:

из начального состояния 1, представляющего смешанное состояние, взаимодействие переводит систему за некоторое время в состояние 2. Затем происходит перемешивание фаз, после чего система из смешанного состояния 2 переходит в состояние 3 и так далее.

Применение теории возмущений ограничивает время $t$, для которого можно пользоваться формулой (11,8).

Допустим, что взаимодействие имеет характер столкновений и характеризуется некоторым временем $\tau$. Тогда вероятность перехода должна удовлетворять условию

$$W\tau < 1.$$

Последнее неравенство можно представить в виде

$$W < \frac{1}{\tau} \sim \frac{\Delta\varepsilon}{\hbar} \sim \frac{kT}{\hbar}. \tag{11,12}$$

Следует подчеркнуть, что, несмотря на широкую область применимости основного кинетического уравнения, положенные в его основу рассуждения и допущения представлялись не вполне убедительными.

Картина перемешивания фаз казалась недостаточно обоснованной и даже противоречивой. Действительно, если система после перехода «забывает» о своей предыстории, то непонятно, как в ней происходит односторонняя эволюция во времени.

В работах последних лет удалось получить гораздо более убедительный вывод основного кинетического уравнения, позволивший не только отказаться от гипотезы перемешивания

фаз, но дать ответ на общий вопрос о природе необратимых процессов.

Мы не можем в рамках этой книги изложить современную теорию и дать вывод кинетического уравнения. Можно лишь привести некоторые важнейшие идеи этой теории[1]).

Мы подчеркивали, что эволюция во времени макроскопических систем, обладающих весьма большим числом степеней свободы, принципиально отличается от соответствующих процессов в микроскопических системах, обладающих непрерывным спектром.

Система, испытывающая рассеяние в непрерывном спектре имеет бесконечно большую плотность уровней, иными словами, обладает бесконечно большим числом степеней свободы. Однако характер процессов рассеяния и процессов в макроскопических системах принципиально различен. Процессы рассеяния строго обратимы во времени, тогда как процессы в неравновесных макроскопических системах всегда обратимы. Таким образом, само по себе наличие в системе большого числа степеней свободы не означает еще необратимости. Оказалось, что различие между макроскопическими и микроскопическими системами с большим числом степеней свободы связано с особенностями вида гамильтониана.

Рассмотрим замкнутую макроскопическую систему, находящуюся в начальный момент времени в чистом состоянии. Гамильтониан системы частиц может быть представлен в виде

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \lambda U, \tag{11,13}$$

где $\hat{H}_0$ — гамильтониан в отсутствии взаимодействия. $U$ представляет энергию взаимодействия, а $\lambda$ — малый параметр.

В то время как в процессах рассеяния энергия взаимодействия имеет сингулярность в некоторых точках пространства, в макроскопических системах $U$ распределено в пространстве во всем объеме системы и нигде не имеет особенностей. Это первая отличительная особенность макросистем.

В представлении Гейзенберга статистический оператор

$$\hat{\rho}(t) = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\rho(0)\,e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}, \tag{11,14}$$

так что

$$\langle\hat{L}\rangle = \mathrm{Sp}\left\{e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\hat{L}e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\rho(0)\right\}. \tag{11,15}$$

---

[1]) См., например, G. Chester, The theory of irreversible processes, Rep. Progr., Phys. XXVI, 411 (1963), Г. Честер, Теория необратимых процессов, «Наука», 1966.

Для гамильтониана вида (11,13) можно написать разложение:

$$e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t} + (-1)^n \lambda^n \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \ldots \int_0^{t_{n-1}} dt_n \times \\ \times U(t_1) U(t_2) \ldots U(t_n), \quad (11,16)$$

где обозначено $U(t) = e^{\frac{i\hat{H}_0}{\hbar}t} U(0) e^{-\frac{i\hat{H}_0}{\hbar}t}$. Если подставить разложения (11,16) для $e^{\frac{i}{\hbar_0}\hat{H}t}$ и $e^{-\frac{i}{\hbar_0}\hat{H}t}$ в формулу (11,15), то она будет содержать слагаемые вида

$$\lambda^2 \operatorname{Sp}\{U\hat{L}U\rho(0)\} = \lambda^2 \sum_k \rho(0) \langle\psi_i | U\hat{L}U | \psi_k\rangle \langle\psi_k | U\hat{L}U | \psi_l\rangle, \quad (11,17)$$

где $\psi_k$ — система базисных функций гамильтониана $\hat{H}_0$ без взаимодействия.

Аналогичный вид будут иметь слагаемые, пропорциональные более высоким степеням $\lambda$.

Исследование выражений типа (11,17) показало, что при известных ограничениях на вид оператора $U$, они обнаруживают характерное поведение: благодаря тому, что энергия взаимодействия распределена по всему объему, занимаемому системой частиц, число слагаемых в сумме (11,17) по возбужденным состояниям при $i = l$ в $N$ раз больше, чем при $i \neq l$.

В системе с очень большим числом частиц $N \to \infty$ (при $N/V$ — конечном) это поведение суммы (11,17) приводит к появлению в ней множителя $\delta(\psi_i - \psi_l)$. Это позволяет оставить в полном выражении для среднего $\langle L\rangle$, представляющем бесконечный ряд, последовательность главных членов. Суммирование этих главных членов приводит автоматически к кинетическому уравнению (11,7). Такое поведение матричных элементов в (11,17) характерно только для систем с указанным свойством $U$. Оно не имеет места в соответствующих процессах рассеяния микросистем.

При этом выводе было показано, что применение гипотезы случайных фаз к промежуточным состояниям не требуется. Статистическое описание начального состояния предполагает случайное распределение фаз только этого состояния. Наконец, был выяснен смысл понятия «слабого взаимодействия». Именно слабость взаимодействия означает, что длительность процесса взаимодействия («столкновения») должна быть мала по сравнению с временем между двумя последовательными взаимодействиями.

Работы этого направления позволили не только подтвердить обоснованность и широкую область применимости основного кинетического уравнения, но также позволили установить и его связь с временным уравнением для матрицы плотности. К этому вопросу мы вернемся еще в дальнейшем.

## § 12. Обсуждение основного кинетического уравнения

Основной проблемой, стоящей перед статистической теорией необратимых процессов, является решение принципиального вопроса: каким образом возникает необратимость макроскопических процессов, если движение частиц, из которых состоит макроскопическая система, является обратимым.

Наряду с этой основной принципиальной проблемой перед статистической теорией необратимых процессов стоит более практическая и не менее важная задача получения кинетических законов и входящих в них кинетических коэффициентов.

Последнее десятилетие ознаменовалось большим прогрессом в обоих направлениях. В нашем изложении кинетической теории газов мы увидим, как решается проблема необратимости в простейшем случае идеального газа. Именно, движение частиц совершается по законам классической механики, которые инвариантны относительно замены $t$ на $(-t)$. Необратимость возникала при рассмотрении системы за промежутки времени, весьма большие по сравнению со временем столкновения.

В предыдущем параграфе мы указали, что лишь в последнее время было найдено более или менее удовлетворительное решение принципиального вопроса — как возникает необратимость в поведении макроскопических систем и в чем заключается различие в описании процесса рассеяния в системе из малого числа частиц от взаимодействия в системах, содержащих очень бо́льшое число частиц. Иными словами, удалось сделать достаточно убедительно вывод основного кинетического уравнения.

В последующем изложении кинетической теории газов мы снова вернемся к вопросу о необратимости и разберем его на примере этой, сравнительно более простой системы.

Пока же мы обсудим свойства основного кинетического уравнения на некоторых элементарных примерах. Простота основного кинетического уравнения является обычно кажущейся. Вероятности перехода $\mathfrak{W}_{ik}$ зависят от чисел $N_i$ и $N_k$. Это особенно наглядно будет видно в последующих параграфах, где будет показано, что в идеальном газе изменение состояния частиц происходит при столкновениях, прежде всего попарных. В последнем случае вероятность перехода пропорциональна числу сталкивающихся частиц в обоих состояниях. Если пе-

рейти от суммирования к интегрированию, то кинетическое уравнение (11,9) превратится в нелинейное интегро-дифференциальное уравнение. Поэтому имеется лишь весьма ограниченное число случаев, для которых удается получить хотя бы приближенные решения кинетического уравнения. Некоторые из них будут найдены ниже.

Рассмотрим прежде всего простейшую совокупность атомов, могущих находиться в двух состояниях, 1 и 2. Пусть энергии этих состояний равны $\varepsilon_1$ и $\varepsilon_2$. Если эта система находится в состоянии статистического равновесия и является замкнутой, то имеют место равенства:

$$-\frac{dN_1}{dt} = w_{12}N_1 - w_{21}N_2, \qquad (12,1)$$

$$-\frac{dN_2}{dt} = w_{21}N_2 - w_{12}N_1, \qquad (12,2)$$

для разности $\varepsilon_1 - \varepsilon_2$, меньшей, чем естественная размытость полной энергии системы $\delta\varepsilon$, о которой шла речь в § 15 ч. III.

Принцип детального равновесия можно непосредственно применить к замкнутой системе и получить в соответствии с результатами § 98 ч. V равенство $N_1 = N_2$.

Рассмотрим теперь систему атомов, находящуюся в состоянии статистического равновесия с термостатом. К такой системе принцип детального равновесия непосредственно неприменим. Он применим лишь к замкнутой системе «совокупность атомоз + термостат».

Для числа атомов, находящихся на уровнях 1 и 2, можно написать те же самые выражения (12,1) и (12,2). Однако в них $w_{12} \neq w_{21}$. Действительно, теперь $w_{12}$ означает вероятность изменения состояния замкнутой системы, отвечающего переходу:

атом в состоянии 1<br>термостат в одном<br>из состояний $\Bigg\} \rightarrow \Bigg\{$ атом в состоянии 2<br>термостат в любом из<br>состояний с энергией<br>$E_0 - (\varepsilon_2 - \varepsilon_1)$.

Соответственно, $w_{21}$ представляет вероятность перехода:

атом в состоянии 2<br>термостат в любом из<br>состояний с энергией<br>$E_0 - (\varepsilon_2 - \varepsilon_1)$ $\Bigg\} \rightarrow \Bigg\{$ атом в состоянии 1<br>термостат в одном из<br>состояний с энергией $E_0$.

Ясно, что поскольку состояния термостата при переходе $1 \rightarrow 2$, $2 \rightarrow 1$ могут быть различны, к этим переходам нельзя применять принцип детального равновесия.

К вероятностям $w_{12}$ и $w_{21}$ можно применить каноническое распределение, написав

$$\frac{w_{12}}{w_{21}} = \frac{\Omega\left(E_0 - (\varepsilon_2 - \varepsilon_1)\right)}{\Omega(E_0)} = e^{\sigma(E_0-(\varepsilon_2-\varepsilon_1))-\sigma(E_0)} \approx e^{-\left(\frac{\partial\sigma}{\partial E}\right)(\varepsilon_2-\varepsilon_1)} = e^{-\frac{\varepsilon_1-\varepsilon_2}{kT}}.$$

Отсюда находим

$$w_{12} = w_{21}\cdot e^{-\frac{\varepsilon_2-\varepsilon_1}{kT}}. \qquad (12,3)$$

При этом (12,1) и (12,2) приводят к распределению Гиббса:

$$N_2^{(0)} = N_1^{(0)}\frac{w_{12}}{w_{21}} = N_1^{(0)}e^{-\frac{\varepsilon_2-\varepsilon_1}{kT}}. \qquad (12,4)$$

Рассмотрим теперь ту же систему в термостате, находящуюся в момент времени $t$ в неравновесном состоянии. Тогда

$$-\frac{dN_1}{dt} = N_1 w_{12} - w_{21}N_2 = \frac{dN_2}{dt}. \qquad (12,5)$$

Положим, что отклонение от неравновесного состояния мало́, так что

$$N_1 = N_1^{(0)} + N_1', \qquad (12,6)$$

$$N_2 = N_2^{(0)} + N_2'. \qquad (12,7)$$

При этом находим

$$-\frac{dN_1'}{dt} = N_1' w_{12} - w_{21}N_2' = \frac{dN_2'}{dt}. \qquad (12,8)$$

В правой части кинетических уравнений (12,8) можно для $w_{12}$ и $w_{21}$ написать равновесное соотношение (12,3). Тогда

$$-\frac{d\left(N_2' - N_1'\right)}{dt} = 2\left(N_2' w_{21} - N_1' w_{12}\right) \approx 2w_{21}\left(N_2' - N_1' e^{-\frac{\varepsilon_2-\varepsilon_1}{kT}}\right).$$

При высоких температурах $\frac{\varepsilon_2-\varepsilon_1}{kT} \ll 1$ и, следовательно,

$$-\frac{d\left(N_2' - N_1'\right)}{dt} \approx 2w_{21}\left(N_2' - N_1'\right) = \frac{\left(N_2' - N_1'\right)}{\tau},$$

откуда

$$N_2' - N_1' = (N_2' - N_1')_0\, e^{-\frac{t}{\tau}}.$$

Число систем в неравновесном состоянии экспоненциально уменьшается с временем релаксации $\tau$, равным

$$\tau = \frac{1}{2w_{21}}. \qquad (12,9)$$

Перейдем к обсуждению более сложной системы, когда в термостат заключена система атомов и излучение.

Атомы, находящиеся в состоянии 1 с энергией $\varepsilon_1$, могут поглощать фотоны с энергией $h\nu = \varepsilon_2 - \varepsilon_1$. Вероятность такого поглощения

$$w_{12} = B_{12}\rho(\nu,\ T),$$

где $\rho(\nu, T)$ — плотность энергии, приходящаяся на единичный интервал частот (ср. § 74 ч. III), а $B_{12}$ — коэффициент пропорциональности. Убыль числа атомов в состоянии 1 дается выражением

$$-\frac{dN_1}{dt} = B_{12}\rho(\nu,\ T)\,N_1. \qquad (12,10)$$

Атомы, находящиеся в состоянии 2, переходят в состояние 1 в результате двух процессов: самопроизвольного и вынужденного излучений. Самопроизвольное излучение имеет место как в отсутствие излучения, так и в его присутствии. Обозначим вероятность самопроизвольного (спонтанного) излучения с переходом $2 \to 1$ через $A_{21}$.

В системе атомов, взаимодействующих с излучением на основании принципа детального равновесия, должен происходить процесс излучения, обратный процессу поглощения. Это излучение называется вынужденным. Вероятность вынужденного излучения равна

$$w_{21} = B_{21}\rho(\nu,\ T),$$

где

$$B_{21} = B_{12}.$$

Поэтому изменение числа атомов в состоянии 2 дается формулой

$$-\frac{dN_2}{dt} = A_{21}N_2 + B_{21}\rho(\nu,\ T)\,N_2. \qquad (12,11)$$

Если система (атомы + излучение) находится в равновесии, то

$$\frac{dN_1}{dt} = \frac{dN_2}{dt}$$

и

$$N_1B_{12}\rho(\nu,\ T) = A_{21}N_2 + B_{21}\rho(\nu,\ T)\,N_2,$$

или

$$\frac{N_2}{N_1} = \frac{B_{12}\rho\,(\nu,\ T)}{A_{21} + B_{12}\rho\,(\nu,\ T)}. \qquad (12,12)$$

С другой стороны, в состоянии равновесия $N_2/N_1$ выражается формулой Больцмана. Поэтому для равновесной плотности

энергии излучения находим

$$\rho(\nu, T)=\frac{A_{21}}{B_{12}}\frac{1}{e^{\frac{\varepsilon_2-\varepsilon_1}{kT}}-1}=\frac{A_{21}}{B_{12}}\frac{1}{e^{h\nu/kT}-1}. \qquad (12,13)$$

Мы приходим, таким образом, к формуле Планка.

Отношение $A_{21}/B_{12}$ может быть найдено путем перехода к формуле Рэлея — Джинса (т. е. перехода к малому значению $(h\nu/kT)\ll 1$).

Приведенный вывод формулы Планка был дан Эйнштейном. Обобщение его на случай атомов с произвольным числом уровней не представляет труда.

## § 13. Неравновесные системы с отрицательной температурой и усиление ими электромагнитных волн

Статистические системы, обладающие конечным числом уровней, обладают некоторыми замечательными особенностями. Подчеркнем прежде всего, что если все энергетические уровни системы лежат в ограниченном интервале энергий, то приведенная в § 17 ч. III аргументация по поводу существенно положительного значения температуры теряет силу. Действительно, в § 17 ч. III утверждалось, что если бы температура $\theta$ была меньше нуля, распределение Гиббса нельзя было бы подчинить условию нормировки и оно потеряло бы всякий смысл. Однако, если энергия пробегает лишь конечный ряд значений, нормировка распределения Гиббса может быть проведена при любом значении $\theta$.

Рассмотрим систему из $N$ атомов с конечным числом $n$ уровней энергии, находящуюся в термостате. Хотя в действительности у атомов не бывает конечного числа уровней, для последующих рассуждений достаточно, чтобы группа близких уровней была отделена от остальных уровней широким энергетическим интервалом.

Как мы видели в § 40 ч. III, при $T=0$ все атомы находятся на нижнем уровне энергии, а при $T\gg T_c$, где $T_c=\frac{\varepsilon_n-\varepsilon_1}{k}$, распределение по уровням становится равномерным. При промежуточных значениях температуры число атомов на уровне с данной энергией, часто называемое заселенностью уровня, определяется формулой (12,4).

Представим себе теперь, что атомы не предоставлены самим себе, но к ним извне подводится энергия. Ниже мы разберем один из способов, которым можно практически подводить

энергию к системе атомов. Если в системе атомов имеется также некоторый механизм потери энергии, то в известных условиях система придет в неравновесное, но стационарное состояние. Количества подводимой и теряемой энергии будут равны между собой и в системе установится не зависящее от времени распределение атомов по уровням энергии. Это распределение будет отлично от равновесного. Заселенность уровней в системе будет отлична от (12,4). Именно, в известных условиях, в частности, при достаточно большом значении энергии, подводимой к системе, заселенность верхних уровней станет выше, чем нижних.

Если бы мы захотели описать состояние нашей неравновесной системы в терминах распределения Гиббса (12,4), то мы сказали бы, что система обладает отрицательной температурой для описания стационарных состояний. Такая терминология является весьма целесообразной.

Ход шкалы температур определится, очевидно, следующим рассуждением, которое для простоты мы проведем на примере системы с двумя уровнями.

Из формул (40,4) и (40,7) ч. III следует, что при $T=0$ все атомы находятся на нижнем уровне, так что энтропия системы равна нулю. При $T\to\infty$ (фактически при $T\gg T_c$) оба уровня заполнены равномерно, а энтропия максимальна. Ясно, однако, что при $T\to-\infty$ получается тот же результат: заселение верхнего и нижнего уровней одинаково. При уменьшении $|T|$ в области отрицательных температур частицы постепенно переходят на верхний уровень и при $T\to-0$ на этом уровне оказываются все частицы, тогда как нижний уровень совершенно не заселен. Энтропия системы снова равна нулю.

Рассмотрим теперь количественно один из возможных методов получения систем с отрицательной температурой.

Пусть, например, имеется плазма, в которой электроны и атомы (или ионы) имеют различные температуры (т. е. разные средние кинетические энергии). Пусть атомы имеют три уровня с энергиями $\varepsilon_1$, $\varepsilon_2$ и $\varepsilon_3$. Напишем кинетическое уравнение для чисел атомов, находящихся на этих уровнях.

При столкновении с электронами атомы с вероятностями $w_{ik}$ $(k>i)$ переходят на верхний уровень. Таким столкновениям отвечает переход кинетической энергии электронов во внутреннюю энергию атомов (удары первого рода). Кроме того, на основании принципа детального равновесия, с вероятностью $w_{ki}$ $(k>i)$, происходят удары второго рода, при которых внутренняя энергия атомов передается электронам. Наконец, атомы, находящиеся в возбужденных состояниях, могут высвечивать энергию с вероятностью $w_{\text{изл}}$.

Учитывая эти процессы, можем написать для числа возбужденных частиц:

$$-\frac{dN_1}{dt}=w_{12}N_1+w_{13}N_1-w_{21}N_2-w_{31}N_3-w^{(21)}_{\text{изл}}N_2-w^{(31)}_{\text{изл}}N_3,$$

$$-\frac{dN_2}{dt}=w_{21}N_2+w_{23}N_2+w^{(21)}_{\text{изл}}N_2-w_{12}N_1-w_{32}N_3-w^{(32)}_{\text{изл}}N_3,$$

$$-\frac{dN_3}{dt}=w_{31}N_3+w_{32}N_3+w^{(31)}_{\text{изл}}N_1+w^{(32)}_{\text{изл}}N_3-w_{13}N_1-w_{23}N_2.$$

В случае, когда возбуждение электронами компенсируется дезактивацией ударами второго рода и излучением, возникает стационарное состояние, при котором все производные по времени обращаются в нуль. Считая вероятность перехода со второго на третий уровень $w_{23}=w_{32}$ равной нулю, а также равной нулю $w^{(32)}_{\text{изл}}$ (так называемый запрещенный переход), получаем из второго уравнения

$$-w_{21}N_2+w_{12}N_1-w^{(21)}_{\text{изл}}N_2=0.$$

Если, кроме того, вероятность высвечивания $w^{21}_{\text{изл}}$ больше, чем вероятность удара второго рода $w_{21}$, то

$$N_2\approx\frac{w_{12}}{w^{(21)}_{\text{изл}}}N_1.$$

Третье уравнение дает при условии $w^{(31)}_{\text{изл}}\gg w_{31}$:

$$N_3\approx N_1\cdot\frac{w_{13}}{w^{(31)}_{\text{изл}}}=\frac{w_{13}}{w^{(31)}_{\text{изл}}}\frac{w^{(21)}_{\text{изл}}}{w_{12}}N_2.$$

Для отношения вероятностей $w_{13}/w_{12}$ можно написать формулу, аналогичную (12,3), в которую входит температура того термостата, с которым происходит обмен энергией, в данном случае электронного газа с температурой $T_{\text{эл}}$:

$$w_{12}=w_{21}e^{-\frac{\varepsilon_2-\varepsilon_1}{kT_{\text{эл}}}},$$

$$w_{13}=w_{31}e^{-\frac{\varepsilon_3-\varepsilon_1}{kT_{\text{эл}}}},$$

$$\frac{w_{12}}{w_{13}}=\frac{w_{21}}{w_{31}}e^{-\frac{\varepsilon_3-\varepsilon_2}{kT_{\text{эл}}}}.$$

Поэтому окончательно:

$$N_2 = \frac{w_{21}}{w_{\text{изл}}^{(21)}} e^{-\frac{\varepsilon_2-\varepsilon_1}{kT_{\text{эл}}}} N_1, \tag{13,1}$$

$$N_3 = \frac{w_{\text{изл}}^{(21)}}{w_{21}} \frac{w_{31}}{w_{\text{изл}}^{(31)}} e^{-\frac{\varepsilon_3-\varepsilon_2}{kT_{\text{эл}}}} N_2. \tag{13,2}$$

В окончательную формулу вошли отношения вероятностей двух возможных видов перехода с уровней 2 и 3 — путем излучения и с помощью ударов второго рода. По предположению, первая вероятность много больше второй. Поскольку $\varepsilon_2 > \varepsilon_1$, из (13,1) следует $N_2 \ll N_1$. Наоборот, хотя $\varepsilon_3 > \varepsilon_2$, при достаточно большом значении предэкспоненциального множителя, в (13,2) эта формула приводит к значениям $N_3 > N_2$. Это означает, что благодаря запрету перехода с третьего уровня на второй столкновения с электронами переходят большее число атомов на уровень 3, чем на уровень 2.

Уровень 3 имеет, таким образом, отрицательную температуру по отношению к уровню 2. Подчеркнем, что разобранный способ получения отрицательных температур не является самым важным и распространенным на практике. Однако он наиболее простым образом позволяет выявить необходимые для этого физические условия[1]).

Мы можем теперь перейти к упомянутым выше свойствам систем с отрицательной температурой.

Если рассмотреть взаимодействие системы при $T < 0$ с излучением, то сразу ясно, что это взаимодействие принципиально отличается от взаимодействия с системой при температуре $T > 0$. Предположим, что на систему действует монохроматическое излучение с частотой

$$\nu = \frac{\Delta\varepsilon}{h} = \frac{\varepsilon_3 - \varepsilon_2}{h}.$$

Это излучение будет поглощаться, причем поглощенная интенсивность $I^-$ пропорциональна числу атомов в состоянии 2 и плотности излучения:

$$I^- B_{23} N_2 \rho.$$

---

[1]) Более подробно о методах получения отрицательных температур см. обзор: Н. Г. Басов, О. Н. Крохин, Ю. М. Попов, Генерация, усиление и индикация излучения с помощью квантовых систем, УФН, т. 72, вып. 2, 1960; А. Вейлстеке, Основы теории квантовых усилителей и генераторов, ИЛ, 1963; Н. В. Карлов, А. А. Маненков, Квантовые усилители, «Итоги науки», ВИНИТИ, М., 1966.

Наряду с поглощением будет иметь место излучение атомов, находящихся в состоянии 3, вынужденное и спонтанное. Излучаемая интенсивность равна (ср. (12,11)):

$$I^+ = B_{32}N_3\rho + A_{32}N_3.$$

Разность интенсивностей

$$I^+ - I^- = B_{32}\rho\,(N_3 - N_2) + A_{32}N_3.$$

Если $N_3 - N_2 > 0$, т. е. если уровень 3 имеет отрицательную температуру по отношению к уровню 2, то, проходя через систему, излучение будет не ослабляться поглощением, а усиливаться благодаря вынужденной эмиссии.

На использовании этого эффекта основана работа мазеров и лазеров — квантовомеханических усилителей и генераторов. Они находят все более широкое применение в современной радиотехнике. Лазеры являются наиболее эффективными современными генераторами в области инфракрасного и оптического диапазонов волн.

ГЛАВА III

# КИНЕТИЧЕСКАЯ ТЕОРИЯ ГАЗОВ И ГАЗОПОДОБНЫХ СИСТЕМ

## § 14. Кинетическое уравнение Больцмана

Мы подчеркивали выше, что решение основного кинетического уравнения сталкивается с очень значительными трудностями. Поэтому основные практические результаты получены при рассмотрении таких физических систем, для которых основное кинетическое уравнение может быть заменено более простым кинетическим уравнением.

Основное кинетическое уравнение определяет числа $N_i$ или распределение частиц по состояниям с учетом всех связей и взаимодействий, существующих между частицами системы.

Однако ясно, что в ряде случаев такое описание макросистем является слишком детальным. Это прежде всего относится к идеальному газу. В классическом приближении, которым мы будем в дальнейшем ограничиваться, вместо числа частиц в данном состоянии можно описывать состояние системы непрерывной функцией распределения. Последняя, в силу отсутствия взаимодействия между частицами, распадается на произведение функций распределения отдельных частиц. Задание функции распределения отдельной частицы позволяет полностью описать свойства идеального газа как целого.

Рассмотрим функцию распределения для молекулы неравновесного идеального газа. Мы знаем, что в идеальном газе каждую молекулу можно считать квазизамкнутой подсистемой.

В отличие от равновесного газа, функция распределения зависит, вообще говоря, от координат $x$, $y$, $z$, компонент импульса $p_x$, $p_y$, $p_z$ и времени $t$. В дальнейшем удобно ввести следующие обозначения: пусть $dn$ — число молекул, изобразительные точки которых лежат в элементе фазового пространства

$$d\gamma = dx\,dy\,dz\,dp_x\,dp_y\,dp_z = d\mathbf{p}\,dV$$

в момент времени $t$. Тогда

$$dn = f(\mathbf{r},\ \mathbf{p},\ t)\,d\gamma,$$

где $f(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{p}, t)$ является искомой функцией распределения. Изменение величины $dn$ во времени (т. е. изменение числа изобразительных точек, находящихся в элементе объема $d\gamma$) обусловлено соударениями между молекулами газа.

Если в результате столкновения двух молекул, имеющих импульсы $\boldsymbol{p}_1$ и $\boldsymbol{p}_2$, одна из них получает импульс $\boldsymbol{p}$, то при этом ее изобразительная точка попадает в элемент пространства $d\gamma$. Если, наоборот, молекула, имевшая импульс $\boldsymbol{p}$, сталкивается с другой молекулой и приобретает новый импульс, ее изобразительная точка выходит из объема $d\gamma$. Очевидно, что чем больше объем $d\gamma$, тем больше (при прочих равных условиях) число молекул, изобразительные точки которых входят и выходят из этого объема в единицу времени. Изменение числа частиц в элементе фазового объема в единицу времени. Изменение числа частиц в элементе фазового объема в единицу времени можно написать в виде

$$\frac{d\,(dn)}{dt} = \frac{df\,(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{p}, t)\,d\gamma}{dt} = (b - a)\,d\gamma,$$

где $(a\,d\gamma)$ — число молекул, изобразительные точки которых покидают элемент объема $d\gamma$ в результате столкновений типа $(\boldsymbol{p}, \boldsymbol{p}_1) \to (\boldsymbol{p}_2, \boldsymbol{p}_3)$, и $(b\,d\gamma)$, аналогичным образом, число молекул, изобразительные точки которых входят в элемент объема $d\gamma$ вследствие столкновений типа $(\boldsymbol{p}_2, \boldsymbol{p}_3) \to (\boldsymbol{p}, \boldsymbol{p}_1)$.

Таким образом, имеем

$$\frac{df}{dt} = b - a.$$

Полную производную $\frac{df\,(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{p}, t)}{dt}$ можно, очевидно, представить в виде

$$\frac{df}{dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial p_x}\frac{dp_x}{dt} + \frac{\partial f}{\partial p_y}\frac{dp_y}{dt} + \frac{\partial f}{\partial p_z}\frac{dp_z}{dt} + \\ + \frac{\partial f}{\partial x}\frac{dx}{dt} + \frac{\partial f}{\partial y}\frac{dy}{dt} + \frac{\partial f}{\partial z}\frac{dz}{dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + \frac{d\boldsymbol{p}}{dt}\frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{p}} + \frac{d\boldsymbol{r}}{dt}\frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{r}},$$

или

$$\frac{df\,(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{p}, t)}{dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{r}}\frac{\boldsymbol{p}}{m} + \frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{p}}\boldsymbol{F},$$

где $\frac{\boldsymbol{p}}{m} = \boldsymbol{v}$ — скорость молекулы, а $\frac{d\boldsymbol{p}}{dt} = \boldsymbol{F}$ — сила, действующая на молекулу, имеющую импульс и координаты, лежащие в элементе фазового объема $d\gamma$ в момент времени $t$.

Окончательно находим

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\boldsymbol{p}}{m}\frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{r}} + \boldsymbol{F}\frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{p}} = I, \tag{14,1}$$

где $I = b - a$.

Дальнейшая задача заключается в нахождении величины $I = b - a$, именуемой обычно интегралом столкновений. Интеграл столкновений может быть найден для достаточно разреженного газа, в котором столкновения происходят только попарно. Мы будем предполагать, что при столкновениях не происходит перехода кинетической энергии в энергию, отвечающую другим степеням свободы, т. е. что столкновения молекул происходят по законам упругих столкновений твердых шаров.

При попарных упругих столкновениях одинаковых частиц выполняются законы сохранения импульса и энергии, которые можно записать в таком виде:

$$\boldsymbol{p}_1 + \boldsymbol{p} = \boldsymbol{p}_3 + \boldsymbol{p}_2, \tag{14,2}$$

$$p_1^2 + p^2 = p_3^2 + p_2^2. \tag{14,3}$$

Процесс упругого столкновения молекул можно охарактеризовать дифференциальным эффективным сечением рассеяния в элемент телесного угла $d\Omega_1$. При этом эффективное сечение зависит от абсолютной величины относительной скорости сталкивающихся частиц $v_{\text{отн}} = |\boldsymbol{v} - \boldsymbol{v}_1|$ и угла рассеяния $\alpha = \alpha(\boldsymbol{v}, \boldsymbol{v}_1)$. Поэтому дифференциальное сечение рассеяния частицы, имеющей скорость $\boldsymbol{v}$, в телесный угол $d\Omega_1$ можно написать в виде

$$d\sigma = \sigma(v_{\text{отн}}, \alpha)\, d\Omega_1. \tag{14,4}$$

Каждая из $f(\boldsymbol{p}, \boldsymbol{r}, t)\, d\boldsymbol{p}\, dV$ частиц, имеющих импульс $\boldsymbol{p}$, испытывает за 1 секунду столкновения с частицами, имеющими импульс $\boldsymbol{p}_1$ и находящимися в цилиндре с высотою $v_{\text{отн}}$ и площадью основания $d\sigma$. Число последних равно $v_{\text{отн}} d\sigma f(\boldsymbol{p}_1, \boldsymbol{r}, t)\, d\boldsymbol{p}_1$. Поэтому полное число попарных столкновений, испытываемых за 1 секунду частицами, находящимися в элементе фазового объема $d\gamma$, равно

$$v_{\text{отн}}\sigma(v_{\text{отн}}, \alpha)\, d\Omega_1 f(\boldsymbol{p}, \boldsymbol{r}, t)\, d\boldsymbol{p}\, dV f(\boldsymbol{p}_1, \boldsymbol{r}, t)\, d\boldsymbol{p}_1.$$

Для нахождения интересующей нас величины $a\, d\gamma$ мы должны учесть, что любое столкновение, испытываемое частицей с импульсом $\boldsymbol{p}$, приводит к изменению $\boldsymbol{p}$ и выводу ее изобразительной точки из объема $d\gamma$. Поэтому

$$a\, d\gamma = d\boldsymbol{p}\, dV \int\int v_{\text{отн}}\sigma(v_{\text{отн}}, \alpha) f(\boldsymbol{p}, \boldsymbol{r}, t) f(\boldsymbol{p}_1, \boldsymbol{r}, t)\, d\boldsymbol{p}_1\, d\Omega_1$$

или

$$a = \int\int v_{\text{отн}}\sigma(v_{\text{отн}}, \alpha) f(\boldsymbol{p}, \boldsymbol{r}, t) f(\boldsymbol{p}_1, \boldsymbol{r}, t)\, d\boldsymbol{p}_1\, d\Omega_1. \tag{14,5}$$

Интегрирование производится по всему телесному углу $\Omega_1$ и всем значениям импульса $p_1$. Аналогично может быть найдено число соударений, в результате которых в объеме $d\gamma$ появляются изобразительные точки, т. е. число столкновений типа

$$(p_2, p_3) \to (p, p_1).$$

Можно написать, очевидно, что число столкновений молекул с импульсами $p_2$ и $p_2$ за 1 секунду равно

$$v'_{\text{отн}}\sigma(v'_{\text{отн}}, \alpha)\, d\Omega_1 f(p_2, r, t) f(p_3, r, t)\, dV\, dp_2\, dp_3,$$

где $v'_{\text{отн}} = |v_2 - v_3|$.

Интересующая нас величина $b\,d\gamma$ получится интегрированием последнего выражения по всем значениям импульсов $p_2$ и $p_3$, удовлетворяющих условиям (14,2) и (14,3):

$$b\,d\gamma = dV \int\int\int v'_{\text{отн}}\sigma(v'_{\text{отн}}, \alpha) f(p_2, r, t) f(p_3, r, t)\, dp_2\, dp_3\, d\Omega_1. \quad (14,6)$$

Законы упругого удара позволяют выразить $v'_{\text{отн}}$ через $v_{\text{отн}}$ и $dp_2\,dp_3$ через $dp\,dp_1$. Именно, относительная скорость после столкновения $v'_{\text{отн}} = |v_2 - v_3|$ равна относительной скорости до столкновения $v_{\text{отн}} = |v - v_1|$. Для перехода от интегрирования по $dp_2\,dp_3$ к $dp\,dp_1$ можно написать

$$dp_2\,dp_3 = \left|\frac{\partial(p_2, p_3)}{\partial(p, p_1)}\right| dp_1\,dp.$$

Модуль якобиана преобразования $p_2, p_3 \to p, p_1$ удобно вычислить, направив вектор $p$ по оси $x$.

Простое вычисление дает

$$\left|\frac{\partial(p_2, p_3)}{\partial(p, p_1)}\right| = 1,$$

поэтому

$$dp_2\,dp_3 = dp_1\,dp.$$

Подставляя последнее равенство в (14,6), находим

$$b = \int\int v_{\text{отн}}\sigma(v_{\text{отн}}, \alpha) f(p_2, r, t) f(p_3, r, t)\, dp_1\, d\Omega_1. \quad (14,7)$$

В функциях $f(p_2, r, t)$ и $f(p_2, r, t)$ для выполнения интегрирования векторы $p_2$ и $p_3$ должны быть выражены через $p$ и $p_1$.

С помощью найденных значений $b$ и $a$ интеграл столкновений можно написать в симметричном виде:

$$I = b - a = \int\int v_{\text{отн}}\sigma(v_{\text{отн}}, \alpha)\,[f(p_2, r, t) f(p_3, r, t) - f(p, r, t) f(p_1, r, t)]\, dp_1\, d\Omega_1. \quad (14,8)$$

Подставляя значение интеграла столкновений в (14,1), приходим к уравнению:

$$\frac{\partial f}{\partial t}+\frac{\boldsymbol{p}}{m}\frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{r}}+\boldsymbol{F}\frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{p}}=\int\int v_{\text{отн}}\sigma(v_{\text{отн}},\ \alpha)\,[f(\boldsymbol{p}_2,\ \boldsymbol{r},\ t)\,f(\boldsymbol{p}_3,\ \boldsymbol{r},\ t)-$$
$$-f(\boldsymbol{p},\ \boldsymbol{r},\ t)\,f(\boldsymbol{p}_1,\ \boldsymbol{r},\ t)]\,d\boldsymbol{p}_1\,d\Omega_1. \qquad (14,9)$$

В дальнейшем для краткости мы будем писать вместо $f(\boldsymbol{p},\boldsymbol{r},t)$, $f(\boldsymbol{p}_1,\boldsymbol{r},t)$, $f(\boldsymbol{p}_2,\boldsymbol{r},t)$ и $f(\boldsymbol{p}_3,\boldsymbol{r},t)$ соответственно $f$, $f_1$, $f_2$ и $f_3$ и вместо $\sigma(\boldsymbol{v}_{\text{отн}},\alpha)$ просто $\sigma$.

В этих обозначениях имеем

$$\frac{\partial f}{\partial t}+\frac{\boldsymbol{p}}{m}\frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{r}}+\boldsymbol{F}\frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{p}}=\int\int v_{\text{отн}}\sigma\,[f_2f_3-ff_1]\,d\boldsymbol{p}_1\,d\Omega_1. \qquad (14,10)$$

Найденное интегро-дифференциальное уравнение (14,9) (или, в краткой записи, (14,10)) для функции распределения носит название кинетического уравнения Больцмана.

Значение уравнения Больцмана далеко выходит за рамки физической кинетики идеального газа. Как будет видно из ряда примеров, которые будут рассмотрены в дальнейшем в этой и других главах книги, целый ряд физических систем, очень далеких, по существу, от идеального газа, по формальным признакам удовлетворяет требованиям, положенным в основу вывода кинетического уравнения Больцмана, и описываются этим уравнением.

С математической точки зрения уравнение Больцмана представляет нелинейное интегро-дифференциальное уравнение с частными производными. Для того чтобы уравнение Больцмана приобрело конкретный смысл, необходимо знать зависимость эффективного сечения от относительной скорости и угла рассеяния, а также поле сил, действующих на частицы газа. Однако даже при простейших предположениях о виде функции $\sigma(v_{\text{отн}},\alpha)$ и о характере поля сил провести его интегрирование весьма трудно.

Ниже будут изложены методы решения уравнения Больцмана. Пока заметим, что наряду с импульсами часто удобно пользоваться в качестве переменных скоростями молекулы. В переменных $(v,r,t)$ уравнение Больцмана приобретает вид

$$\frac{\partial f}{\partial t}+\boldsymbol{v}\frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{r}}+\frac{\boldsymbol{F}}{m}\frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{v}}=\int \sigma v_{\text{отн}}\,[f_2f_3-ff_1]\,d\boldsymbol{v}_1\,d\boldsymbol{\Omega}. \qquad (14,11)$$

В дальнейшем мы будем переходить от переменных $\boldsymbol{p}$ к переменным $\boldsymbol{v}$ или от (14,9) к (14,11), не делая специальных оговорок. Мы не будем также оговаривать переход от векторных к тензорным обозначениям, в которых (14,11) приобретает вид

$$\frac{\partial f}{\partial t}+v_i\frac{\partial f}{\partial x_i}+\frac{F_i}{m}\frac{\partial f}{\partial v_i}=\int \sigma v_{\text{отн}}\,[f_2f_3-ff_1]\,d\boldsymbol{v}_1\,d\boldsymbol{\Omega}. \qquad (14,12)$$

Иногда уравнение Больцмана записывают в более симметричном представлении, при котором в интеграле столкновений проводится интегрирование по всем значениям импульсов сталкивающихся частиц.

Именно в силу законов сохранения импульса и энергии можно написать

$$b - a = \int \sigma v_{\text{отн}} [f_2 f_3 - f f_1] \, d\boldsymbol{p}_1 \, d\boldsymbol{\Omega} =$$
$$= \int \sigma v_{\text{отн}} [f_2 f_3 - f f_1] \, \delta(\boldsymbol{p}_3 + \boldsymbol{p}_2 - \boldsymbol{p}_1 - \boldsymbol{p}) \, d\boldsymbol{p}_1 \, d\boldsymbol{p}_2 \times$$
$$\times \delta(\varepsilon_2 + \varepsilon_3 - \varepsilon - \varepsilon_1) \, d\varepsilon_3 \, d\boldsymbol{\Omega}, \quad (14{,}13)$$

где дельта-функция векторного аргумента $\delta(\boldsymbol{p})$ означает

$$\delta(\boldsymbol{p}) = \delta(p_x) \, \delta(p_y) \, \delta(p_z).$$

Вместо интегрирования по энергии $\varepsilon_3$ можно ввести интегрирование по импульсу $p_3$, поскольку

$$d\varepsilon_3 \, d\Omega \, \delta(\varepsilon_2 + \varepsilon_3 - \varepsilon_1 - \varepsilon) = 2m \, \delta(p_2^2 + p_3^2 - p_1^2 - p^2) \, d\varepsilon_3 \, d\boldsymbol{\Omega} =$$
$$= \frac{2p_3}{m} \, d\Omega \, dp_3 \, \delta(p_2^2 + p_3^2 - p_1^2 - p^2) = \delta(p_2^2 + p_3^2 - p_1^2 - p^2) \frac{2d\boldsymbol{p}_3}{p_3}.$$

Поэтому можно переписать (14,8) в виде

$$b - a = \int \sigma v_{\text{отн}} [f_2 f_3 - f_1 f] \, \delta(\boldsymbol{p}_2 + \boldsymbol{p}_3 - \boldsymbol{p}_1 - \boldsymbol{p}) \times$$
$$\times \delta(p_3^2 + p_2^2 - p_1^2 - p^2) \left( \frac{1}{p_3} + \frac{1}{p_2} \right) \frac{d\boldsymbol{p}_1 \, d\boldsymbol{p}_2 \, d\boldsymbol{\Omega}}{m}. \quad (14{,}14)$$

При этом мы вместо $\frac{2}{p_3}$ написали симметричное выражение $\left( \frac{1}{p_2} + \frac{1}{p_3} \right)$, воспользовавшись полным равноправием импульсов $\boldsymbol{p}_3$ и $\boldsymbol{p}_2$.

## § 15. Основное кинетическое уравнение для коррелятивной функции

Приведенный выше вывод уравнения Больцмана, весьма простой и наглядный, страдает, однако, рядом недостатков, как принципиальных, так и практических. Действительно, в этом выводе рассмотрены только попарные соударения молекул. При этом парный характер соударений является весьма существенным, и совершенно не видно, каким образом можно обобщить вывод на случай тройных, четверных и т. д. столкновений. Вся область применимости общей теории суживается до случая весьма разреженных газов. С другой стороны, в приведенном выводе совершенно не видно важного принципиального мо-

мента: с одной стороны, в его сторону положены обратимые во времени уравнения классической механики. Движение частиц и их соударения совершаются по строго детерминизированным законам. С другой стороны, из уравнения Больцмана вытекает, что в результате соударений в газе устанавливается молекулярный хаос и энтропия газа монотонно возрастает, стремясь к некоторому пределу (см. § 19). При этом не ясно, в каком именно месте в ход выкладок вносится статистический, вероятностный момент. Многие критики работ Больцмана усматривали в этом парадоксальный и необоснованный результат. Поэтому весьма существенно получить более последовательный и прозрачный вывод уравнения Больцмана.

Мы приведем вариант такого вывода, основанный на использовании коррелятивных функций [1]).

В части III были определены коррелятивные функции $\rho_m$, для которых получена система зацепляющихся уравнений, в которой коррелятивные функции младшего порядка выражаются через функции старшего порядка.

При этом, однако, мы ограничивались коррелятивными функциями, зависящими от координат частиц. Сейчас нам необходимо обобщить определение коррелятивных функций на случай, когда они зависят также от импульсов и времени.

Чтобы избежать громоздких обозначений, всю совокупность переменных $(p_1, p_2, \ldots, p_{3N}; q_1, q_2, \ldots, q_{3N}, t)$ мы запишем как $(x_N, t)$. Функция распределения системы, содержащей $N$ частиц $\rho(x_N, t)$, должна удовлетворять общему уравнению

$$\frac{d\rho(x_N, t)}{dt} = 0, \tag{15,1}$$

выражающему закон сохранения числа изобразительных точек в фазовом пространстве. Распишем полную производную в виде

$$\frac{d\rho}{dt} = \frac{\partial\rho}{\partial t} + \frac{\partial\rho}{\partial p_i}\frac{dp_i}{dt} + \frac{\partial\rho}{\partial q_i}\frac{dq_i}{dt} =$$
$$= \frac{\partial\rho}{\partial t} - \frac{\partial\rho}{\partial p_i}\frac{\partial H}{\partial q_i} + \frac{\partial\rho}{\partial q_i}\frac{\partial H}{\partial p_i} = \frac{\partial\rho}{\partial t} - \{H; \rho\} = 0. \tag{15,2}$$

Уравнение (15,2) носит название уравнения Лиувилля.

В рассматриваемом нами случае системы взаимодействующих частиц функция Гамильтона имеет вид

$$H = \sum \frac{p_i^2}{2m} + \frac{1}{2}\sum U_{ij}(|q_i - q_j|)$$

[1]) См. Н. Н. Боголюбов, Проблемы динамической теории в статистической физике, Гостехиздат, 1946.

и скобка Пуассона $\{H;\ \rho\}$ определена равенством

$$\{H;\ \rho\} = \sum_i \left(\frac{\partial H}{\partial q_i}\frac{\partial \rho}{\partial p_i} - \frac{\partial H}{\partial p_i}\frac{\partial \rho}{\partial q_i}\right). \qquad (15,3)$$

Взаимодействие между частицами считается парным. Введем коррелятивную функцию $\rho_s$, определив ее так же, как и в § 48 ч. III:

$$\rho_s(x_1, x_2, \ldots, x_s, t) = V^s \int \rho(x_1, x_2, \ldots, x_N)\, dx_{s+1} \ldots dx_N. \qquad (15,4)$$

В дальнейшем нас будет интересовать только ординарная функция

$$\rho_1(x_1, t) \equiv \rho_1(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{p}_1, t) = (V/N)\, f(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{p}_1, t), \qquad (15,5)$$

представляющая (с точностью до множителя $V/N$) функцию распределения частиц в газе, и бинарная функция

$$\rho_{12}(x_1, x_2, t) \equiv \rho_{12}(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{p}_1, \boldsymbol{r}_2, \boldsymbol{p}_2, t) = V^2/N^2 f_{12}(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2, \boldsymbol{p}_1, \boldsymbol{p}_2, t).$$

Пользуясь определениями (15,2) и (15,3), находим

$$-\frac{\partial \rho_1}{\partial t} \equiv V/N\,\frac{\partial f}{\partial t} = V\int \{H;\ \rho\}\, dx_2 \ldots dx_N =$$
$$= V\sum_{i=1}^{N}\left(\frac{\partial H}{\partial p_i}\frac{\partial \rho}{\partial q_i} - \frac{\partial H}{\partial q_i}\frac{\partial \rho}{\partial p_i}\right) dx_2 \ldots dx_N =$$
$$= V\int \left(\frac{\partial H}{\partial p_1}\frac{\partial \rho}{\partial q_1} - \frac{\partial H}{\partial q_1}\frac{\partial \rho}{\partial p_1}\right) dx_2 \ldots dx_N +$$
$$+ V\sum_{i=2}^{N}\int \left(\frac{\partial H}{\partial p_i}\frac{\partial \rho}{\partial q_i} - \frac{\partial H}{\partial q_i}\frac{\partial \rho}{\partial p_i}\right) dx_2 \ldots dx_N =$$
$$= V\int \frac{\boldsymbol{p}_1}{m}\frac{\partial \rho}{\partial \boldsymbol{r}_1}\, dx_2 \ldots dx_N - \int \frac{\partial \rho}{\partial \boldsymbol{p}_1}\frac{\partial H}{\partial \boldsymbol{r}_1}\, dx_2 \ldots dx_N +$$
$$+ V\sum_{i=2}^{N}\int \left(\frac{\partial H}{\partial p_i}\frac{\partial \rho}{\partial q_i} - \frac{\partial H}{\partial q_i}\frac{\partial \rho}{\partial p_i}\right) dx_2 \ldots dx_N. \qquad (15,6)$$

Имеем очевидно

$$\int \frac{\boldsymbol{p}_1}{m}\frac{\partial \rho}{\partial \boldsymbol{r}_1}\, dx_2 \ldots dx_N = \frac{\boldsymbol{p}_1}{m}\frac{1}{V}\frac{\partial \rho_1}{\partial \boldsymbol{r}_1}. \qquad (15,7)$$

Далее, поскольку все частицы одинаковы,

$$\int \frac{\partial \rho}{\partial \boldsymbol{p}_1}\left(\sum_{i=2}^{N}\frac{\partial U_{1i}}{\partial \boldsymbol{r}_1}\right) dx_2 \ldots dx_N = (N-1)\int \frac{\partial \rho}{\partial \boldsymbol{p}_1}\frac{\partial U_{12}}{\partial \boldsymbol{r}_1}\, dx_2 \ldots dx_N =$$
$$= \frac{N-1}{V^2}\int \frac{\partial U_{12}}{\partial \boldsymbol{r}_1}\frac{\partial \rho_{12}}{\partial \boldsymbol{p}_1}\, d\boldsymbol{r}_2\, d\boldsymbol{p}_2. \qquad (15,8)$$

Наконец, члены оставшейся суммы можно написать в виде

$$\int dx_3 \ldots dx_{i-1}\, dx_{i+1} \ldots dx_N \int \left(\frac{\partial H}{\partial p_i} \frac{\partial \rho}{\partial q_i} - \frac{\partial H}{\partial q_i} \frac{\partial \rho}{\partial p_i}\right) dx_i =$$
$$= \int dx_3 \ldots dx_{i-1}\, dx_{i+1} \ldots dx_N \left[\int \frac{\mathbf{p}_i}{m}\, d\mathbf{p}_i \int \frac{\partial \rho}{\partial \mathbf{r}_i}\, d\mathbf{r}_i - \right.$$
$$\left. - \int \frac{\partial H}{\partial \mathbf{r}_i}\, d\mathbf{r}_i \int \frac{\partial \rho}{\partial \mathbf{p}_i}\, d\mathbf{p}_i \right].$$

При всех разумных предположениях о виде функции распределения можно считать, что

$$\int \frac{\partial \rho}{\partial \mathbf{r}_i}\, d\mathbf{r}_i \to 0; \quad \int \frac{\partial \rho}{\partial \mathbf{p}_i}\, d\mathbf{p}_i \to 0 \qquad (15,9)$$

при неограниченном возрастании области интегрирования. Таким образом, все слагаемые третьей суммы в (15,6) равны нулю; пользуясь (15,7) и (15,8) получаем вместо (15,6)

$$\frac{\partial \rho_1}{\partial t} + \frac{\mathbf{p}_1}{m} \frac{\partial \rho_1}{\partial \mathbf{r}_1} = \frac{N-1}{V} \int \frac{\partial U_{12}}{\partial \mathbf{r}_1} \frac{\partial \rho_{12}}{\partial \mathbf{p}_1}\, d\mathbf{r}_2\, d\mathbf{p}_2. \qquad (15,10)$$

Поскольку $U_{12}$ не зависит от импульсов, можно написать

$$\frac{\partial U_{12}}{\partial \mathbf{r}_1} \frac{\partial \rho_{12}}{\partial \mathbf{p}_1} = \frac{\partial U_{12}}{\partial \mathbf{r}_1} \frac{\partial \rho_{12}}{\partial \mathbf{p}_1} - \frac{\partial U_{12}}{\partial \mathbf{p}_1} \frac{\partial \rho_{12}}{\partial \mathbf{r}_1} = \{U_{12};\ \rho_{12}\},$$

так что (15,10) можно представить в виде (опуская индекс $1$)

$$\frac{\partial \rho_1}{\partial t} + \frac{\mathbf{p}}{m} \frac{\partial \rho_{12}}{\partial \mathbf{r}} = \frac{N-1}{V} \int \{U_{12};\ f_{12}\}\, d\mathbf{r}_2\, d\mathbf{p}_2. \qquad (15,11)$$

Переходя к пределу бесконечно большой системы ($N \to \infty$; $V \to \infty$), имеющей большой, но конечный удельный объем $v = \frac{V}{N}$, имеем

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\mathbf{p}}{m} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} = \int \{U_{12};\ f_{12}\}\, d\mathbf{r}_2\, d\mathbf{p}_2. \qquad (15,12)$$

Уравнение (15,12) определяет закон изменения ординарной функции $f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$ от координат, импульсов и времени. Мы будем именовать его основным кинетическим уравнением для одинарной функции распределения $f$.

Как и в равновесном газе, $\rho_1$ выражается через $\rho_{12}$. В свою очередь, повторяя предыдущие выкладки, можно получить аналогичное уравнение для $\rho_{12}(x_1, x_2, t)$. Оно имеет аналогичный вид и содержит тернарную функцию $\rho_{123}$. Мы не будем, однако, выписывать это уравнение, поскольку в разрежённом газе величина $1/v$ весьма мала и является малым параметром в уравнении для $\rho_1$. Если мы будем интересоваться значением $\rho_1$ в первом

приближении по малому параметру $1/v$, то в выражение (15,12) следует подставить значение $\rho_{12}$ в нулевом приближении. Последнее может быть найдено без кинетического уравнения для $\rho_{12}$.

## § 16. Вывод уравнения Больцмана из основного кинетического уравнения

Рассмотрим достаточно разреженный газ, в котором частицы испытывают только попарные столкновения.

Для простоты в дальнейшем мы будем считать газ пространственно однородным, так что функция распределения $\rho_1$ зависит только от импульсов $\boldsymbol{p}$ и времени $t$, т. е.

$$\rho_1(t, x_1) = \rho_1(t, \boldsymbol{p}).$$

При этом бинарная функция распределения не должна изменяться при пространственном смещении двух частиц на постоянный вектор $\boldsymbol{a}$, т. е.

$$\rho_{12}(t, \boldsymbol{r}_1 + \boldsymbol{a}, \boldsymbol{r}_2 + \boldsymbol{a}, \boldsymbol{p}_1, \boldsymbol{p}_2) = \rho_{12}(t, \boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2, \boldsymbol{p}_1, \boldsymbol{p}_2).$$

Это условие выполняется только в том случае, когда $\rho_{12}$ является функцией расстояния между частицами $\boldsymbol{r}_{12} = \boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_2$,

$$\rho_{12} = \rho_{12}(t, \boldsymbol{r}_{12}, \boldsymbol{p}_1, \boldsymbol{p}_2).$$

Мы можем, очевидно, ввести следующую шкалу возрастающих времен: 1) время столкновения $\tau_c \sim \frac{r_0}{\bar{v}}$, где $r_0$ — радиус сферы взаимодействия и $\bar{v}$ — средняя скорость; 2) среднее время между двумя последовательными соударениями, $\tau \sim \frac{\lambda}{\bar{v}}$, где $\lambda$ — средняя длина свободного пробега; как мы увидим в дальнейшем, $\tau$ представляет время релаксации в микроскопических объемах газа; 3) макроскопическое время релаксации или гидродинамическое время $\tau_{\text{macro}} \sim \frac{L}{\bar{v}}$, где $L$ — макроскопическая длина, например, размер сосуда с газом.

Очевидно, что всегда

$$\tau_c \ll \tau \ll \tau_{\text{macro}}. \tag{16,1}$$

Рассмотрим поведение газа в течение промежутков времени $\Delta t$ таких, что $\tau_c < \Delta t \ll \tau$. За это время лишь очень немногие молекулы в газе успевают испытать столкновения. Поэтому поведение во времени основного числа частиц за времена $\Delta t$ описываются функцией $\rho_1$.

Те немногие частицы, которые за время $\Delta t$ успевают испытать столкновения, мысленно объединим в пары. Ясно, что число

пар весьма мало́ по сравнению с полным числом частиц $N$. Поведение пар описывается, очевидно, бинарной коррелятивной функцией $\rho_{12}$. Наша задача заключается в установлении связи между $\rho_1$ и $\rho_{12}$. Это будет сделано в результате рассуждения, которое, строго говоря, справедливо лишь для времени порядка $\Delta t$.

Рассмотрим поведение коррелятивных функций в предельном случае $\frac{1}{v} \to 0$.

Уравнение для функции распределения при бесконечно малой плотности газа в пространственно однородном газе приобретает вид

$$\frac{d\rho_1(p, t)}{dt} = 0. \tag{16,2}$$

Формула (16,2) имеет простой смысл — в этом приближении частицы движутся независимо друг от друга.

Решение уравнения (16,2) удобно записать в символическом виде

$$\rho_1(p_1, t) = S_t^{(1)} \rho_1(p_1, t - \tau_c). \tag{16,3}$$

Оператор $S_t^{(1)}$ действует на функцию $\rho_1$, зависящую от переменных $x_1$, переводя функцию, взятую в начальный момент времени $(t - \tau_c)$, в функцию в момент времени $t$. Поскольку без столкновений частицы движутся в однородном газе с постоянным импульсом,

$$\rho_1(p_1, t) = \rho_1(p_1, t - \tau_c). \tag{16,4}$$

Аналогичным образом можно написать в приближении $\frac{1}{v} \to 0$ уравнение для коррелятивной функции $\rho_{12}$. Оно имеет, очевидно, вид

$$\frac{d\rho_{12}^{(0)}}{dt} = 0. \tag{16,5}$$

Соответственно можно написать решение уравнения (16,5) в символическом виде

$$\rho_{12}^{(0)}(t, x_1, x_2) = S_t^{(2)} \rho_{12}(t - \tau_c, x_1, x_2). \tag{16,6}$$

Оператор $S_t^{(2)}$ действует на функцию $\rho_{12}(x_1, x_2)$, зависящую от пары аргументов $x_1$ и $x_2$, переводя ее от значения в начальный момент времени $t - \tau_c$ к значению в момент времени $t$.

Уравнение (16,6) описывает поведение пары молекул, не подвергающихся воздействию со стороны остальных молекул.

Ясно, что такое рассмотрение и само уравнение (16,5) имеет строгий смысл только за промежуток времени меньший, чем время между последовательными столкновениями $\tau$. Поскольку,

однако, это время весьма велико по сравнению с временем столкновения, мы можем приближенно пользоваться (16,5) и для больших времен, т. е. будем полагать $t \to \infty$. Это основное допущение излагаемой теории, принадлежащей Н. Н. Боголюбову.

Запишем (16,6) в виде

$$\rho_{12}^{(0)}(t, x_1, x_2) = S_t^{(2)} \rho_{12}(t - \tau_c, x_1, x_2) = \\ = S_t^{(2)} [\rho_{12}(t - \tau_c, x_1, x_2) - \rho_1(t - \tau_c, x_1) \rho_1(t - \tau_c, x_2)] + \\ + S_t^{(2)} \rho_1(t - \tau_c, x_1) \rho_1(t - \tau_c, x_2). \quad (16,7)$$

Перейдем к пределу $t \to -\infty$, т. е. рассмотрим коррелятивную функцию задолго до столкновения. Очевидно, что при $t \to -\infty$ поведение пары частиц не коррелятивно и

$$\lim_{t \to -\infty} S^{(2)} \rho_{12}(t - \tau_c, x_1, x_2) = \rho_1(t - \tau_c, x_1) \cdot \rho_1(t - \tau_c, x_2). \quad (16,8)$$

Поэтому можно написать условие ослабления корреляции

$$\lim_{t \to -\infty} \rho_{12}(t, x_1, x_2) = \rho_1(t - \tau_c, x_1) \rho_1(t - \tau_c, x_2). \quad (16,9)$$

Функция распределения $\rho_1$, в пространственно однородном газе зависит только от импульса. Пределу $t \to -\infty$ отвечают предельные значения импульсов частиц, входящих в момент времени $t = \tau_0$ в столкновение $\boldsymbol{P}_1$ и $\boldsymbol{P}_2$, так что

$$\lim_{t \to -\infty} S_t^{-(2)} \boldsymbol{p}_1 = \boldsymbol{P}_1, \quad (16,10)$$

$$\lim_{t \to -\infty} S_t^{-(2)} \boldsymbol{p}_2 = \boldsymbol{P}_2, \quad (16,11)$$

где $\boldsymbol{P}_1$ и $\boldsymbol{P}_2$ — предельные значения импульсов частиц до столкновения, когда они находятся вне сферы взаимодействия.

Очевидно, что $\boldsymbol{P}_1$ и $\boldsymbol{P}_2$ связаны с импульсами $\boldsymbol{p}_1$ и $\boldsymbol{p}_2$ сталкивающихся частиц соотношением

$$H = \frac{p_1^2 + p_2^2}{2m} + U(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2) = \frac{P_1^2 + P_2^2}{2m}. \quad (16,12)$$

Пользуясь (16,10)—(16,11) и учитывая (16,5), можно приближенно представить (16,9) в виде

$$\rho_{12}^{(0)}(t, x_1, x_2) \simeq \lim_{t \to -\infty} S_t^{(2)} [\rho_{12}(t - \tau_c, x_1, x_2) - \\ - \rho_1(t - \tau_c, x_1) \rho_1(t - \tau_c, x_2)] + \lim_{t \to -\infty} S_t^{(2)} \rho_1(t - \tau_c, x_1) \rho_1(t - \tau_c, x_2) = \\ = \rho_1(0, \boldsymbol{P}_1) \rho_1(0, \boldsymbol{P}_2) = \rho_1(t, \boldsymbol{P}_1) \rho_1(t, \boldsymbol{P}_2). \quad (16,13)$$

Формула (16,13) позволяет выразить бинарную функцию распределения $\rho_{12}$ через унарную функцию $\rho_1$. Однако, в то время

как $\rho_{12}$ является функцией импульсов $\boldsymbol{p}_1$ и $\boldsymbol{p}_2$ частиц, сталкивающихся в момент времени $t$, в формуле (16,13) функции $\rho_1$ зависят от другого аргумента — предельных значений импульсов $\boldsymbol{P}_1$ и $\boldsymbol{P}_2$ до столкновения.

Если мы захотим теперь перейти к получению функции распределения при конечном, но малом значении параметра $1/v$, то бинарную функцию нулевого приближения (16,13) следует подставить в правую часть уравнения (15,12). Это дает

$$\frac{\partial f(t, \boldsymbol{P}_1)}{\partial t} = \int \{U_{12};\ f(t, \boldsymbol{P}_1) f(t, \boldsymbol{P}_2)\}\, d\boldsymbol{r}_2\, d\boldsymbol{p}_2. \tag{16,14}$$

Преобразуем скобки Пуассона, воспользовавшись тем, что импульсы $\boldsymbol{P}_1$ и $\boldsymbol{P}_2$ — постоянные заданные векторы.

Благодаря этому

$$\{H;\ f(t, \boldsymbol{P}_1) f(t, \boldsymbol{P}_2)\} = 0. \tag{16,15}$$

Пользуясь (16,15), находим

$$\left\{\frac{p_1^2 + p_2^2}{2m} + U_{12};\ f(t, \boldsymbol{P}_1) f(t, \boldsymbol{P}_2)\right\} = 0,$$

откуда следует

$$\{U_{12};\ f(t, \boldsymbol{P}_1) f(t, \boldsymbol{P}_2)\} = -\left\{\frac{p_1^2 + p_2^2}{2m};\ f(t, \boldsymbol{P}_1) f(t, \boldsymbol{P}_2)\right\} =$$

$$= -\frac{\boldsymbol{p}_1}{m} \frac{\partial [f(t, \boldsymbol{P}_1) f(t, \boldsymbol{P}_2)]}{\partial (\boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_2)} + \frac{\boldsymbol{p}_2}{m} \frac{\partial [f(t, \boldsymbol{P}_1) f(t, \boldsymbol{P}_2)]}{\partial (\boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_2)} =$$

$$= -\frac{\boldsymbol{p}_1 - \boldsymbol{p}_2}{m} \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{r}_{12}} [f(t, \boldsymbol{P}_1) f(t, \boldsymbol{P}_2)].$$

Таким образом, уравнение (16,14) можно представить в виде

$$\frac{\partial f(t, \boldsymbol{p})}{\partial t} = -\int \frac{(\boldsymbol{p}_2 - \boldsymbol{p}_1)}{m} \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{r}_{12}} [f(t, \boldsymbol{P}_1) f(t, \boldsymbol{P}_2)]\, d\boldsymbol{r}_2\, d\boldsymbol{p}_2 = \int I\, d\boldsymbol{p}_2, \tag{16,16}$$

где через $I$ обозначен интеграл

$$I = \int \frac{\boldsymbol{p}_1 - \boldsymbol{p}_2}{m} \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{r}_{12}} [f(t, \boldsymbol{P}_1) f(t, \boldsymbol{P}_2)]\, d\boldsymbol{r}_2.$$

Для вычисления последнего введем цилиндрическую систему координат $(r, \varphi, \xi)$, выбрав вектор $(\boldsymbol{p}_2 - \boldsymbol{p}_1)$ за положительное направление полярной оси $\xi$. Тогда имеем

$$x_1 = x_2 + r \sin\varphi,$$
$$y_1 = y_2 + r \cos\varphi,$$
$$z_1 = z_2 + \xi,$$
$$(\boldsymbol{p}_2 - \boldsymbol{p}_1) = [(p_2 - p_1),\ 0,\ 0],$$
$$d\boldsymbol{r}_{12} = r\, dr\, d\varphi\, d\xi,$$

так что можно написать

$$(\boldsymbol{p}_2-\boldsymbol{p}_1)\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{r}_{12}}[f(t,\ \boldsymbol{P}_1)f(t,\ \boldsymbol{P}_2)]=\frac{p_2-p_1}{m}\frac{\partial}{\partial \xi}[f(t,\ \boldsymbol{P}_1)f(t,\ \boldsymbol{P}_2)].$$

Импульсы $\boldsymbol{P}_1$ и $\boldsymbol{P}_2$ будут теперь функциями координат $r$, $\varphi$ и $\xi$. За начало координат выберем точку $r_{12}=0$, т. е. точку, в которой происходит столкновение. При таком выборе осей имеем

$$I=\frac{p_2-p_1}{m}\int_0^\infty r\,dr\int_0^{2\pi}d\varphi\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\partial}{\partial \xi}[f(t,\ \boldsymbol{P}_1)f(t,\ \boldsymbol{P}_2)]\,d\xi=$$

$$=2\pi\frac{(p_2-p_1)}{m}\int_0^\infty r\,dr\,[f(t,\ \boldsymbol{P}_1)f(t,\ \boldsymbol{P}_2)]\,\Big|_{\xi\to-\infty}^{\xi\to\infty}.$$

Рассмотрим произведение

$$f(t,\ \boldsymbol{P}_1)f(t,\ \boldsymbol{P}_2)\,|^{\xi\to\infty}=f(t-t'',\ \boldsymbol{P}_1)f(t-t'',\ \boldsymbol{P}_2)\,|^{\xi\to\infty},\qquad(16,17)$$

где $t''\leqslant\tau$. Ситуации $\xi\to\infty$ отвечают частицы, находящиеся на большом расстоянии друг от друга (вне области взаимодействия). При этом частицы удаляются друг от друга (это проще всего видно из того, что $\frac{p_2-p_1}{m}=v_{\text{отн}}$ растет с ростом $\xi$). Это значит, что если частицы в момент времени $t$ находятся на большом расстоянии, то в прошлом, в некоторый момент $t-t''$, они были на близком расстоянии, провзаимодействовали и затем разошлись. Импульсы $\boldsymbol{P}_1$ и $\boldsymbol{P}_2$ в (16,17) означают импульсы частиц до столкновения, в частности, непосредственно перед входом в соударение. Мы запишем это в виде

$$f(\boldsymbol{P}_1,\ t)f(\boldsymbol{P}_2,\ t)\,|^{\xi\to\infty}=f(\boldsymbol{P}_1^*,\ t)f(\boldsymbol{P}_2^*,\ t),\qquad(16,18)$$

где $\boldsymbol{P}_1^*$ и $\boldsymbol{P}_2^*$ — импульсы непосредственно перед соударением.

Произведение $f(\boldsymbol{P}_1,\ t)f(\boldsymbol{P}_2,\ t)\,|^{\xi\to-\infty}$ имеет другой смысл. Ситуация $\xi\to-\infty$ также отвечает частицам, находящимся в момент $t$ на больших расстояниях, вне области взаимодействия. Однако эти частицы за промежуток времени от $t-\tau_c$ до $t$ не успели сблизиться и столкнуться. Они движутся с постоянными значениями импульса, так что

$$f(\boldsymbol{P}_2,\ t)f(\boldsymbol{P}_1,\ t)\,|^{\xi\to-\infty}=f(\boldsymbol{p}_2,\ t)f(\boldsymbol{p}_1,\ t),\qquad(16,19)$$

где $\boldsymbol{p}_1$ и $\boldsymbol{p}_2$ — импульсы в момент $t$. Подставляя (16,18) и (16,19) в интеграл $I$, находим

$$I=\frac{p_2-p_1}{m}\int_0^\infty r\,dr\int d\varphi\,[f(\boldsymbol{P}_1^*,\ t)f(\boldsymbol{P}_2^*,\ t)-f(\boldsymbol{p}_1,\ t)f(\boldsymbol{p}_2,\ t)].\qquad(16,20)$$

Подставляя (16,20) в (16,16), находим, что кинетическое уравнение приобретает вид

$$\frac{\partial f(p_1, t)}{\partial t} = \int\int r\,dr\,d\varphi \int v_{\text{отн}} [f(P_1^*, t) f(P_2^*, t) - f(p_1, t) f(p_2, t)]\,dp_2. \tag{16,21}$$

При этом мы ввели относительную скорость частиц

$$v_{\text{отн}} = \frac{|p_2 - p_1|}{m}.$$

В подынтегральное выражение входят импульсы $P_1^*$ и $P_2^*$ непосредственно перед столкновением. Ввиду симметрии задачи двух тел к обращению времени можно наряду с (16,21), написать

$$\frac{\partial f(p_1, t)}{\partial t} = \int r\,dr\,d\varphi \int v_{\text{отн}} [f(p_3, t) f(p_4, t) - f(p_2, t) f(p_1, t)]\,dp_2, \tag{16,22}$$

где $p_3$ и $p_4$ — импульсы после столкновения. Вместо прицельного параметра $r$ и азимутального угла можно ввести телесный угол и эффективное сечение соотношением

$$r\,dr\,d\varphi = \sigma\,d\boldsymbol{\Omega}.$$

Произведя в (16,21) эту замену, мы приходим к уравнению Больцмана:

$$\frac{\partial f(p_1, t)}{\partial t} = \int v_{\text{отн}}\sigma [f(p_3, t) f(p_4, t) - f(p_2, t) f(p_1, t)]\,dp_2\,d\boldsymbol{\Omega}. \tag{16,23}$$

В случае неоднородного газа аналогичным образом получается несколько видоизмененное уравнение Больцмана. Мы видели, что переход от обратимых уравнений механики — уравнения Лиувилля (15,2) к уравнению Больцмана включал в себя статистический этап — формулу (16,13). В формуле (16,13) с самого начала заложено допущение об асимметрии процесса во времени. Фиксируя состояния газа в данный момент времени $t$, мы анализировали вопрос о том, как он пришел в данное состояние. При этом статистическое распределение в данный момент связывается с тем, каким оно было в прошлом. Иными словами, система случайно попадает в ситуацию, которую мы называем столкновением. До столкновения «пара» частиц состояла из невзаимодействующих частиц. Их встреча в момент времени $t$ является случайным актом. Начиная с этого момента и вплоть до момента $t + \tau$, когда частицы «пары» испытывают следующее столкновение, их движение имеет детерминированный характер. Таким образом, в самом выводе уравнения Больцмана заложено допущение об асимметрии времени и различие начального и конечного состояний. Поведение системы за время $t - \tau_c$ и $t + \tau$ существенно различное.

Приведенный вывод уравнения Больцмана содержит в явном виде разложение по малому параметру $\frac{1}{v}$.

Пользуясь развитой техникой разложений по параметру $\frac{1}{v}$, можно получить кинетическое уравнение для более плотных газов, чем те, которые описываются уравнением Больцмана. Однако этот вывод связан с громоздкими выкладками и мы его приводить не будем [1]).

## § 17. Обобщенное уравнение переноса и свойства аддитивных инвариантов

Из уравнения Больцмана можно получить ряд важных общих следствий, не связанных с нахождением явного вида функции распределения.

Допустим, что газ как целое совершает движение со средней скоростью $\boldsymbol{u}$. Оказывается, что с помощью уравнения Больцмана можно найти общее уравнение, которому должно удовлетворять среднее значение произвольной функции скорости относительного движения

$$V_i = v_i - u_i, \tag{17,1}$$

т. е. функции $\psi(V_i - u_i)$, где $i = x, y, z$.

Среднее значение этой функции

$$\bar{\psi}(\boldsymbol{r}, t) = \frac{\int \psi f\, d\boldsymbol{v}}{\int f\, d\boldsymbol{v}} = \frac{1}{N} \int \psi(V_i) f\, d\boldsymbol{v}, \tag{17,2}$$

где $N$ — число частиц в единице объема, является, вообще говоря, функцией координат и времени, поскольку от этих переменных зависит функция распределения $f$. Составим производную

$$\bar{\psi} \frac{\partial N}{\partial t} + N \frac{\partial \bar{\psi}}{\partial t} = \int \psi(V_i) \frac{\partial f}{\partial t}\, d\boldsymbol{v}. \tag{17,3}$$

Пользуясь уравнением Больцмана, можно представить (17,3) в виде

$$\bar{\psi} \frac{\partial N}{\partial t} + N \frac{\partial \bar{\psi}}{\partial t} =$$
$$= -\int \psi(V_i)\, v_k \frac{\partial f}{\partial x_k}\, d\boldsymbol{v} - \int \psi(V_i) \frac{F_k}{m} \cdot \frac{\partial f}{\partial v_k}\, d\boldsymbol{v} + \int \psi(V_i)\, I\, d\boldsymbol{v}. \tag{17,4}$$

---

[1]) См. цитированную монографию Н. Н. Боголюбова, а также Д. Уленбек и Д. Форд, Лекции по статистической механике, «Мир», 1965. G. E. Uhlenbeck, G. Ford, Lectures in statictical mechanics American Mathemat. Society, Providence, 1963.

Преобразуем интегралы, входящие в (17,4). Имеем, очевидно,

$$\int \psi v_k \frac{\partial f}{\partial x_k} dv = \frac{\partial}{\partial x_k} \int \psi v_k f \, dv = \frac{\partial}{\partial x_k} N\left(\overline{v_k \psi}\right),$$

$$\int \psi \frac{F_k}{m} \frac{\partial f}{\partial v_k} dv = \frac{F_k}{m} \psi f \Big|_{|v| \to \infty} - \frac{F_k}{m} \int f \frac{\partial \psi}{\partial v_k} dv =$$

$$= -\frac{F_k}{m} \int f \frac{\partial \psi}{\partial v_k} dv = -\frac{F_k}{m} N\left(\overline{\frac{\partial \psi}{\partial v_k}}\right).$$

При этом предполагается, что функция распределения $f$ убывает достаточно быстро с ростом абсолютной величины скорости, так что $(\psi f)$ стремится к нулю при $|v| \to \infty$.

Таким образом, (17,4) приобретает вид

$$\bar{\psi} \frac{\partial N}{\partial t} + N \frac{\partial \bar{\psi}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_k} N\left(\overline{v_k \psi}\right) - N \frac{F_k}{m}\left(\overline{\frac{\partial \psi}{\partial v_k}}\right) = \int \psi I \, dv. \qquad (17,5)$$

Полученное уравнение носит название уравнения Энскога или обобщенного уравнения переноса. Ясно, что в общем виде, при произвольном виде функции $\psi$ уравнение Энскога, нисколько не проще уравнения Больцмана. Если, однако, $\psi$ является одним из аддитивных интегралов движения, т. е.

$$\psi\left(V_i^{\text{отн}}\right) = m, \qquad mV_i, \qquad \frac{m(V)^2}{2}, \qquad (17,6)$$

то обобщенное уравнение переноса существенно упрощается.

Для того чтобы в этом убедиться, рассмотрим важное общее свойство интеграла, входящего в правую часть обобщенного уравнения переноса.

Обозначим его через $G$:

$$G = \int \psi I \, dv = \int \psi \sigma |v - v_1| (f_2 f_3 - f f_1) \, dv \, dv_1 \, d\Omega.$$

симметризуем это выражение, воспользовавшись тем, что при замене аргументов

$$v \to v_1; \qquad v_1 \to v$$

интеграл $G$ не изменяется:

$$G_1 = \int \psi_1 \sigma |v_1 - v| (f_2 f_3 - f f_1) \, dv_1 \, dv \, d\Omega = G.$$

С другой стороны, можно поменять местами пары переменных так, чтобы скорости до и после соударений поменялись местами:

$$v, \ v_1 \to v_2, \ v_3; \qquad v_2, \ v_3 \to v, \ v_1.$$

При этом очевидно имеем

$$|v - v_1| = |v_2 - v_3|$$

и мы вновь получаем

$$G_2 = \int \psi_2 |\boldsymbol{v}_2 - \boldsymbol{v}_3| \sigma [ff_1 - f_2 f_3] \, d\boldsymbol{v}_2 \, d\boldsymbol{v}_3 \, d\boldsymbol{\Omega} = - G_1,$$

$$G_3 = \int \psi_3 |\boldsymbol{v}_3 - \boldsymbol{v}_2| \sigma [f_1 f - f_3 f_2] \, d\boldsymbol{v}_3 \, d\boldsymbol{v}_2 \, d\boldsymbol{\Omega} = - G_1.$$

Суммируя величины $G_i$, можно представить их в симметричном виде

$$\sum G_i = \frac{G_1 + G_2 + G_3 + G_4}{4} = \\ = \frac{1}{4} \int [\psi_2 + \psi_3 - \psi_1 - \psi] \sigma v_{\text{отн}} [f_2 f_3 - ff_1] \, d\boldsymbol{v}_1 \, d\boldsymbol{v} \, d\boldsymbol{\Omega}. \qquad (17,7)$$

Пользуясь симметричным представлением (17,7), можно переписать обобщенное уравнение переноса в виде

$$\bar{\psi} \frac{\partial N}{\partial t} + N \frac{\partial \bar{\psi}}{\partial t} + N \frac{\partial}{\partial x_k} \overline{(v_k \psi)} - N \frac{F_k}{m} \left( \overline{\frac{\partial \psi}{\partial v_k}} \right) = \\ = - \frac{1}{4} \int [\psi_2 + \psi_3 - \psi - \psi_1] \sigma v_{\text{отн}} (f_2 f_3 - ff_1) \, d\boldsymbol{v} \, d\boldsymbol{v}_1 \, d\boldsymbol{\Omega}. \qquad (17,8)$$

Допустим теперь, что $\psi$ является одним из аддитивных интегралов движения.

При столкновении частиц имеют место равенства

$$m_1 + m_2 = \text{const},$$

$$m_1 \boldsymbol{v}_1 + m_2 \boldsymbol{v}_2 = \text{const},$$

$$\frac{m_1 v_1^2}{2} + \frac{m_2 v_2^2}{2} = \text{const}.$$

Для этих пяти аддитивных интегралов движения

$$\psi_2 + \psi_3 = \psi_1 + \psi,$$

поэтому

$$\sum G_i = 0.$$

Таким образом, $\Sigma G_i$ является аддитивным интегральным инвариантом столкновений. Для пяти аддитивных интегралов обобщенное уравнение переноса упрощается и приобретает вид

$$\bar{\psi} \frac{\partial N}{\partial t} + N \frac{\partial \bar{\psi}}{\partial t} + N \frac{\partial}{\partial x_k} \overline{(\psi v_k)} - N \frac{F_k}{m} \left( \overline{\frac{\partial \psi}{\partial v_k}} \right) = 0. \qquad (17,9)$$

Ясно, что уравнение (17,9) существенно проще, чем общее уравнение (17,8), поскольку оно не содержит нелинейных членов, описывающих попарные соударения. По этой же причине уравнение (17,9) обладает большой общностью и фактически применимо и тогда, когда уравнение Больцмана уже теряет силу.

## § 18. Уравнения переноса массы, импульса и энергии

С помощью уравнения (17,9) можно найти макроскопические законы сохранения плотности импульса и энергии. Очевидно, что макроскопическая плотность однородного вещества может быть представлена в виде

$$\rho = mN; \qquad \psi = m.$$

При этом (17,9) дает непосредственно

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_k} \rho u_k = 0. \tag{18,1}$$

Уравнение (18,1) представляет закон сохранения массы в движущейся среде.

Часто приходится иметь дело с многокомпонентным газом, состоящим из молекул с массами $m_\alpha$. В этом случае нужно ввести понятия плотности и скорости $\alpha$-го компонента:

$$\rho_\alpha = N^\alpha m_\alpha = m_\alpha \int f^{(\alpha)}\, dv, \tag{18,2}$$

$$u_i^\alpha = \int v_i^\alpha f^{(\alpha)}\, dv, \tag{18,3}$$

где $\alpha = 1, 2, \ldots, r$, и массовую плотность и скорость:

$$\rho = \sum \rho^\alpha = \sum m^\alpha \int f^\alpha\, dv, \tag{18,4}$$

$$u_k = \frac{1}{\rho} \sum \rho^\alpha u_k^\alpha = \frac{1}{\rho} \sum m^\alpha \int v_k^\alpha f^\alpha\, dv. \tag{18,5}$$

Для величины $\frac{\partial \rho^\alpha}{\partial t}$ можно написать два выражения:

$$\frac{\partial \rho^\alpha}{\partial t} = m^\alpha \int \frac{\partial f^\alpha}{\partial t}\, dv = -\, m^\alpha \int v_k^\alpha \frac{\partial f^\alpha}{\partial x_k}\, dv =$$

$$= -\frac{\partial}{\partial x_k} m^\alpha \int v_k^\alpha f^\alpha\, dv = -\frac{\partial \rho^\alpha u_k^\alpha}{\partial x_k} \tag{18,6}$$

или

$$\frac{\partial \rho^\alpha}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x_k} m^\alpha \int (v_k^\alpha - u_k) f^\alpha\, dv - \frac{\partial}{\partial x_k} m^\alpha u_k \int f^\alpha\, dv =$$

$$= -\frac{\partial}{\partial x_k} (j_k^\alpha + u_k \rho^\alpha). \tag{18,7}$$

При этом мы ввели вектор

$$j_k^\alpha = m^\alpha \int (v_k^\alpha - u_k) f^\alpha \, dv, \tag{18,8}$$

именуемый диффузионным потоком $\alpha$-го компонента. Вектор $j_k^\alpha$ представляет поток $j_k^\alpha$-го компонента относительно средней массовой скорости $u_k$ (ср. с (7,6)).

Формула (18,7) представляет собой закон сохранения массы, написанный для многокомпонентной смеси.

Суммируя выражения (18,8) для разных компонент и учитывая, что

$$\sum j_k^\alpha = \sum m^\alpha \int (v_k^\alpha - u_k) f^\alpha \, dv =$$
$$= \sum m^\alpha \int v_k^\alpha f^\alpha \, dv - u_k \sum m^\alpha \int f^\alpha \, dv = 0,$$

находим закон сохранения полной массы

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x_k} \rho u_k. \tag{18,9}$$

Перейдем теперь к формулировке закона сохранения импульса.

Для получения закона сохранения импульса можно подставить в (17,9) значение $\psi = mV_i$. Удобнее, однако, повторить до известной степени вывод формулы, вычислив производную от вектора импульса единицы объема

$$\rho u_i = Nm \int v_i f \, dv. \tag{18,10}$$

Мы ограничимся при этом случаем однокомпонентного газа.

Имеем очевидно, с помощью уравнения Больцмана и с учетом общего свойства аддитивного интегрального инварианта $G$:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho u_i) = Nm \int v_i \frac{\partial f}{\partial t} \, dv =$$
$$= -Nm \int v_i v_k \frac{\partial f}{\partial x_k} \, dv - mN \int v_i \frac{F_k}{m} \frac{\partial f}{\partial v_k} \, dv =$$
$$= -Nm \int (v_i - u_i)(v_k - u_k) \frac{\partial f}{\partial x_k} \, dv + mNu_i u_k \int \frac{\partial f}{\partial x_k} \, dv -$$
$$- N_m \frac{\partial}{\partial x_k}(u_i u_k) + F_k N \int f \frac{\partial v_i}{\partial v_k} \, dv.$$

При этом мы образовали разности $(v_i - u_i)$ и $(v_k - u_k)$ и проинтегрировали последнее слагаемое по частям. Первый интеграл

преобразуем к производной от интеграла:

$$\int (v_i - u_i)(v_k - u_k)\frac{\partial f}{\partial x_k}\,dv =$$
$$= \int \frac{\partial}{\partial x_k}[(v_i - u_i)(v_k - u_k)f]\,dv - \int f\,\frac{\partial}{\partial x_k}(v_i - u_i)(v_k - u_k)\,dv =$$
$$= \frac{\partial}{\partial x_k}\int (v_i - u_i)(v_k - u_k)f\,dv +$$
$$+ \int f\left[(v_k - u_k)\frac{\partial u_i}{\partial x_k} + (v_i - u_i)\frac{\partial u_k}{\partial x_k}\right]dv =$$
$$= \frac{\partial}{\partial x_k}\int (v_i - u_i)(v_k - u_k)f\,dv + \frac{\partial u_i}{\partial x_k}\int f(v_k - u_k)\,dv +$$
$$+ \frac{\partial u_k}{\partial x_k}\int f(v_i - u_i)\,dv = \frac{\partial}{\partial x_k}\int (v_i - u_i)(v_k - u_k)f\,dv,$$

так как, по определению среднего, интегралы $\int f(v_i - u_i)\,dv = 0$. Кроме того, имеем, очевидно

$$\frac{\partial v_i}{\partial v_k} = \delta_{ik}.$$

Введем вектор силы, отнесенный к единице объема

$$f_k = F_k N \qquad (18,11)$$

и тензор $\sigma_{ik}$, именуемый тензором напряжений:

$$\sigma_{ik} = mN\int (v_i - u_i)(v_k - u_k)f\,dv = mN\overline{(v_i - u_i)(v_k - u_k)}. \qquad (18,12)$$

По определению тензор $\sigma_{ik}$ является симметричным, $\sigma_{ik} = \sigma_{ki}$. Тогда получаем окончательно

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho u_i = -\frac{\partial \sigma_{ik}}{\partial x_k} - \frac{\partial}{\partial x_k}\rho u_i u_k + f_i, \qquad (18,13)$$

или, пользуясь (18,9),

$$\rho\left(\frac{\partial u_i}{\partial t} + u_k\frac{\partial u_i}{\partial x_k}\right) = -\frac{\partial \sigma_{ik}}{\partial x_k} + f_i. \qquad (18,14)$$

Уравнение (18,14) представляет собой макроскопическое уравнение движения газовой среды.

Наконец, можно аналогичным образом получить закон сохранения макроскопической энергии газовой среды. Среднюю энергию единицы объема газа, совершающего макроскопическое

движение со средней скоростью $u$, можно написать в виде

$$E = \frac{1}{2} mN \int (v_i - u_i)^2 f \, dv. \tag{18,15}$$

Дифференцируя по времени, находим аналогично предыдущему:

$$\frac{\partial E}{\partial t} = \frac{1}{2} mN \int (v_i - u_i)^2 \frac{\partial f}{\partial t} dv =$$
$$= -\frac{mN}{2} \int (v_i - u)^2 v_k \frac{\partial f}{\partial x_k} dv - \frac{mN}{2} \int (v_i - u_i)^2 \frac{F_k}{m} \frac{\partial f}{\partial v_k} dv =$$
$$= -(I_1 + I_2) \frac{mN}{2}. \tag{18,16}$$

Преобразуем оба интеграла в отдельности. Имеем

$$I_1 = \int (v_i - u_i)^2 v_k \frac{\partial f}{\partial x_k} dv =$$
$$= \int (v_i - u_i)^2 (v_k - u_k) \frac{\partial f}{\partial x_k} dv + u_k \int (v_i - u_i)^2 \frac{\partial f}{\partial x_k} dv =$$
$$= \frac{\partial}{\partial x_k} \int (v_i - u_i)^2 (v_k - u_k) f \, dv - \int f \frac{\partial}{\partial x_k} [(v_i - u_i)^2 (v_k - u_k)] \, dv +$$
$$+ \frac{\partial}{\partial x_k} u_k \int (v_i - u_i)^2 f \, dv - \int f \frac{\partial}{\partial x_k} [u_k (v_i - u_i)^2] \, dv =$$
$$= \frac{\partial}{\partial x_k} \int (v_i - u_i)^2 (v_k - u_k) f \, dv + \frac{\partial}{\partial x_k} u_k \int (v_i - u_i)^2 f \, dv -$$
$$- \int f v_k \frac{\partial}{\partial x_k} (v_i - u_i)^2 \, dv = \frac{\partial}{\partial x_k} \frac{(2q_k + 2u_k E)}{mN} +$$
$$+ 2 \int f \cdot (v_i - u_i) \, v_k \, dv \cdot \frac{\partial u_i}{\partial x_k} =$$
$$= \frac{\partial}{\partial x_k} \frac{2q_k + 2u_k E}{mN} + 2 \frac{\partial u_i}{\partial x_k} \frac{\sigma_{ik}}{mN} + 2 \int f (v_i - u_i) \, v_k \frac{\partial u_k}{\partial x_k} dv =$$
$$= \frac{\partial}{\partial x_k} \frac{(2q_k + 2u_k E)}{mN} + 2 \frac{\partial u_i}{\partial x_k} \frac{\sigma_{ik}}{mN}.$$

При этом было использовано определение (18,12) и введено обозначение

$$q_k = \frac{mN}{2} \int (v_i - u_i)^2 (v_k - u_k) f \, dv. \tag{18,17}$$

Очевидно, что вектор $q_k$ представляет вектор плотности потока энергии.

Для интеграла $I_2$ имеем

$$I_2=\frac{F_k}{m}\int(v_l-u_l)^2\frac{\partial f}{\partial v_k}\,dv=$$
$$=\frac{F_k}{m}(v_l-u_l)^2 f\Big|_{v\to\infty}-2\frac{F_k}{m}\int(v_l-u_l)\,\delta_{lk}f\,dv=0.$$

Окончательно находим

$$\frac{\partial E}{\partial t}=-\frac{\partial}{\partial x_k}(q_k+Eu_k)-\sigma_{ik}\frac{\partial u_i}{\partial x_k}. \qquad (18,18)$$

Соотношение (18,18) выражает закон сохранения энергии. Изменение энергии в единице объема связано с потоком полной энергии, вытекающим из этого объема $(q_k+Eu_k)$ и работой против внутренних сил $\left(\sigma_{ik}\frac{\partial u_i}{\partial x_k}\right)$. Если выразить энергию идеального газа через температуру, то вместо (18,18) можно написать

$$c_v\frac{\partial T}{\partial t}=-\frac{\partial}{\partial x_k}(q_k+c_vTu_k)-\sigma_{ik}\frac{\partial u_i}{\partial x_k}. \qquad (18,19)$$

Совокупность уравнений (18,9), (18,14) и (18,19) представляет систему уравнений газа в приближении сплошной среды.

Хотя эти уравнения выведены для идеального газа, область их применимости гораздо шире. Они выражают общие законы сохранения в сплошной среде и в таком общем виде применимы не только в разреженном газе, но и к капельным жидкостям. Однако фактическое их использование требует нахождения явного вида тензора напряжений $\sigma_{ik}$ и вектора тока энергии $q_k$. Последнее в свою очередь требует знания функции распределения $f$.

Ниже будет показано, что в некотором приближении функция распределения, а соответственно, и величины $\sigma_{ik}$ и $q_k$, могут быть найдены путем интегрирования уравнения Больцмана для идеального газа.

В капельных жидкостях приходится довольствоваться эмпирическими выражениями $\sigma_{ik}$ и $q_k$. Повторяя аналогичные вычисления, можно без труда получить законы сохранения импульса и энергии для смеси идеальных газов.

## § 19. Закон возрастания энтропии

В статистической физике мы подробно осветили закон возрастания энтропии. В § 25 ч. III был установлен принцип возрастания энтропии. Было показано, что при изменении состояния замкнутой системы энтропия конечного состояния всегда больше, чем энтропия начального состояния.

Однако в рамках статистического рассмотрения невозможно установить, как совершается переход из начального в конечное состояние. В кинетике оказывается возможным более детально изучить характер изменения энтропии и показать, что энтропия идеального газа монотонно возрастает во времени.

Вычислим изменение энтропии единицы объема одноатомного идеального газа, воспользовавшись для этого выражением (25,6) ч. III:

$$s = -k\int f\ln f\,d\boldsymbol{v}.$$

Дифференцируя $s$ по времени и используя уравнение Больцмана, имеем

$$\frac{\partial s}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial t}k\int f\ln f d\boldsymbol{v} = -k\int(1+\ln f)\frac{\partial f}{\partial t}d\boldsymbol{v} = \\ = k\int(1+\ln f)v_k\frac{\partial f}{\partial x_k}d\boldsymbol{v} - k\int(1+\ln f)I\,d\boldsymbol{v} + \\ + k\int(1+\ln f)\frac{F_k}{m}\frac{\partial f}{\partial v_k}d\boldsymbol{v} = k\int(1+\ln f)v_k\frac{\partial f}{\partial x_k}d\boldsymbol{v} - \\ - k\int I(1+\ln f)\,d\boldsymbol{v}.$$

Легко видеть, что опущенное третье слагаемое обращается при интегрировании в нуль.

Преобразуем также первое слагаемое

$$\int(1+\ln f)v_k\frac{\partial f}{\partial x_k}d\boldsymbol{v} = \\ = \frac{\partial}{\partial x_k}\int(1+\ln f)v_k f\,d\boldsymbol{v} - \int f\frac{\partial}{\partial x_k}[(1+\ln f)v_k]\,d\boldsymbol{v} = \\ = \frac{\partial}{\partial x_k}\int f\ln f v_k\,d\boldsymbol{v} = -\frac{\partial j_k^s}{\partial x_k}.$$

Здесь $j_k^s = -\int v_k f\ln f\,d\boldsymbol{v}$ — вектор потока энтропии.

Используя свойства симметрии интеграла соударения (17,7), имеем

$$\frac{\partial s}{\partial t} + \frac{\partial j_k^s}{\partial x_k} = -k\int I(1+\ln f)\,d\boldsymbol{v} = \\ = -\frac{k}{4}\int[\ln f + \ln f_1 - \ln f_2 - \ln f_3](f_2f_3 - f_1f)\,\sigma v_{\text{отн}}\,d\boldsymbol{v}\,d\boldsymbol{v}_1\,d\Omega. \quad (19,1)$$

Формула (19,1) определяет изменение энтропии в данном элементе объема газа. Это изменение связано, с одной стороны,

с потоком энтропии переносимого частицами газа, а с другой стороны, — процессами молекулярных соударений, которые характеризуются правой частью (19,1). Проинтегрируем (19,1) по всему объему $V$ замкнутой системы.

Тогда получаем

$$\frac{\partial S}{\partial t} = \frac{k}{4} \int \ln\left(\frac{f_2 f_3}{f f_1}\right) \cdot (f_2 f_3 - f f_1)\, \sigma v_{\text{отн}}\, d\boldsymbol{v}\, d\boldsymbol{v}_1\, d\Omega\, dV, \qquad (19,2)$$

где $S$ — полная энтропия системы $S = \int s\, dV$. Интеграл

$$\int \frac{\partial j_k^{(S)}}{\partial x_k} dV = \oint j_k\, dS_k = 0,$$

поскольку поток на границе замкнутой системы равен нулю.

Нетрудно заметить, что подынтегральная функция в (19,2) является существенно положительной. Действительно,

$$\ln\left(\frac{f_2 f_3}{f f_1}\right) [f_2 f_3 - f f_1] \geqslant 0. \qquad (19,3)$$

Если $f_2 f_3 > f f_1$, то как логарифм, так и квадратная скобка имеют положительный знак; если $f_2 f_3 < f f_1$, то оба они отрицательны. При $f_3 f_2 = f f_1$ подынтегральная функция обращается в нуль. Поскольку интеграл от существенно положительной функции также положителен, мы видим, что в замкнутой системе

$$\frac{\partial S}{\partial t} \geqslant 0. \qquad (19,4)$$

Таким образом, доказано, что энтропия замкнутой системы — идеального одноатомного газа, монотонно возрастает во времени или постоянна. Мы видим, что кинетическая теория устанавливает характер и детализирует механизм роста энтропии, связывая его с межмолекулярными столкновениями.

## § 20. Равновесное и локально равновесное распределение в идеальном газе

При возрастании энтропии она стремится к некоторому пределу, так что

$$\frac{\partial S}{\partial t} = 0 \quad \text{при} \quad t \to \infty. \qquad (20,1)$$

В действительности энтропия достигает своего максимального значения не при $t \to \infty$, но по прошествии некоторого времени релаксации $\tau$.

Вычисление времени релаксации представляет очень сложную задачу. Ниже мы найдем приближенное значение времени релаксации.

Ясно, что для выполнения равенства (20,1) при $t > \tau$ в формуле (19,3) должен стоять знак равенства, т. е.

$$f_2 f_3 = f f_1. \tag{20,2}$$

Формула (20,2) показывает, что $\ln f$ является аддитивным интегралом движения. При столкновениях двух частиц существует пять и только пять аддитивных интегралов движения [1]): интегралы массы, импульса и энергии.

Поэтому $\ln f$ должна быть линейной функцией этих величин:

$$\ln f = am + b_i m v_i + c\frac{mv_k^2}{2}. \tag{20,3}$$

Заметим, что решение функционального уравнения (20,2), приведенное в статистической физике, было основано на допущении о том, что $f \equiv f(v^2)$. Приводимый здесь вывод свободен от этого допущения.

Постоянные $a$, $b_i$ и $c$ могут быть выражены через число частиц $N$ в 1 $см^3$, среднюю макроскопическую скорость $u_i$ и среднюю энергию одноатомного газа в состоянии равновесия. В частности, если газ как целое покоится и $u_i = 0$, то

$$\int f\, d\boldsymbol{v} = N, \tag{20,4}$$

$$\int v_i f\, d\boldsymbol{v} = 0, \tag{20,5}$$

$$N\int \frac{mv_k^2}{2} f\, d\boldsymbol{v} = \frac{3}{2} NkT. \tag{20,6}$$

Отсюда находим равновесное распределение Максвелла

$$f^{(M)} = N\left(\frac{m}{2\pi kT}\right)^{3/2} e^{-\frac{mv^2}{2kT}}. \tag{20,7}$$

В равновесном газе температура $T$ и плотность $N$ имеют постоянное значение во всем объеме газа и в нем не происходит макроскопического движения.

Если, однако, температура и плотность зависят от координат и времени и газ совершает движение со средней скоростью $u_i$, то интеграл столкновений уравнения Больцмана обращается

---

[1]) См., например, А. Зоммерфельд, Термодинамика и статистическая физика, М., ИЛ, 1955. В более общем случае задачи трех тел имеется восемь аддитивных интегралов — энергии, импульса, момента импульса и массы — см. Уиттекер, Аналитическая механика, Гостехиздат, М., 1937. По-видимому, последняя теорема имеет совершенно общий характер.

в нуль, если положить

$$f^{(0)} = N\left(\frac{m}{2\pi kT}\right)^{3/2} e^{-\frac{m(v-u)^2}{2kT}}, \tag{20,8}$$

где $N$ и $T$ являются функциями координат и времени. Положим для краткости

$$f^{(0)} = e^{\alpha+\beta_i v_i+\gamma v^2}, \tag{20,9}$$

$$\alpha = N\left(\frac{m}{2\pi kT}\right)^{3/2} e^{-\frac{mu^2}{2kT}}, \tag{20,10}$$

$$\beta_i = \frac{mu_i}{kT}, \tag{20,11}$$

$$\gamma = \frac{m}{2kT}. \tag{20,12}$$

Распределение $f^{(0)}$ представляет собой решение уравнения Больцмана, если оно обращает в нуль не только правую, но и левую часть этого уравнения. Для этого $\alpha$, $\beta_i$ и $\gamma$ должны удовлетворять условиям, сформулированным ниже.

Распределение (20,8) или (20,9) носит название локального максвелловского распределения. Подставляя (20,9) в уравнение Больцмана, и учитывая, что равенство нулю его левой части должно выполняться при любых значениях $v_i$, приравниваем нулю в отдельности коэффициенты при разных степенях $v_i$. Тогда получаем систему уравнений

$$\frac{\partial\alpha}{\partial t} + \frac{F_i\beta_i}{m} = 0, \tag{20,13}$$

$$\frac{\partial\beta_i}{\partial t} + 2\gamma\frac{F_i}{m} + \frac{\partial\alpha}{\partial x_i} = 0, \tag{20,14}$$

$$\delta_{ij}\frac{\partial\gamma}{\partial t} + \frac{1}{2}\left(\frac{\partial\beta_i}{\partial x_j} + \frac{\partial\beta_j}{\partial x_i}\right) = 0, \tag{20,15}$$

$$\frac{\partial\gamma}{\partial x_i} = 0. \tag{20,16}$$

Таким образом, уравнения (20,13)—(20,16) накладывают ограничение на среднюю скорость движения $u_i$, совместимую с локальным максвелловским распределением. Формула (20,16) показывает, что температура газа $T$ должна быть постоянной в пространстве. Однако температура газа как целого может изменяться по времени.

Дифференцируя (20,15) по координатам и учитывая (20,16), имеем

$$\frac{\partial^2 u_i}{\partial x_k\,\partial x_j} + \frac{\partial^2 u_j}{\partial x_i\,\partial x_k} = 0,$$

откуда следует

$$\frac{\partial^2 \beta_i}{\partial x_k \partial x_l} = 0. \tag{20,17}$$

Решением уравнения (20,17) служит

$$\left.\begin{aligned} u_i &= a_i(t) + b_{ij}(t)\, x_j \\ \text{или} \quad u_i &= 0. \end{aligned}\right\} \tag{20,18}$$

Коэффициенты $b_{ij}$ можно найти, подставляя (20,18) в (20,15). Тогда получим

$$b_{ij} = -b_{ji}, \qquad b_{ii} = \frac{m}{2kT^2}\frac{\partial T}{\partial t}.$$

Поэтому окончательно

$$u_i = a_i(t) + b_{lk} e_{lkj} x_l + \frac{m}{2kT^2}\frac{\partial T}{\partial t} x_i$$

или, в векторной форме,

$$\boldsymbol{u} = \boldsymbol{a}(t) + [\boldsymbol{\omega}\boldsymbol{r}] + \frac{m}{2kT^2}\frac{\partial T}{\partial t}\boldsymbol{r}. \tag{20,19}$$

Таким образом, с локальным максвелловским распределением совместимо произвольное поступательное и вращательное (с угловой скоростью $\boldsymbol{\omega}$) движение газа как целого и радиальное движение, скорость которого определяется последним слагаемым в (20,19).

Не использованное нами условие (20,14) содержит силы, вид которых накладывает определенные связи на коэффициенты $a_i$ и $b_{ij}$. Если газ заключен в неподвижный сосуд с непроницаемыми стенками, то стационарное движение типа (20,19) в нем невозможно. Это значит, что в (20,18) приходится выбирать $u_i = 0$. Полагая в (20,14) $\beta_i = 0$, находим

$$\frac{\partial \alpha}{\partial x_i} + 2\gamma \frac{F_i}{m} = 0.$$

Если внешние силы имеют потенциал, то $F_i = -\frac{\partial U}{\partial x_i}$ и для $\alpha$ мы имеем

$$\alpha = -\frac{U}{kT} + \mathrm{const}.$$

Тогда нормированное равновесное распределение приобретает вид

$$f^{(\text{М-Б})} = N\left(\frac{m}{2\pi kT}\right)^{3/2} e^{-\frac{mv^2}{2kT}} e^{-\frac{U}{kT}}. \tag{20,20}$$

Таким образом, мы пришли к естественному результату: в газе устанавливается равновесное распределение Максвелла — Больц-

мана (20,6), а не локальное максвелловское распределение (20,8).

Установление равновесного распределения Максвелла — Больцмана связано с установлением распределения по скоростям и в пространстве. Время релаксации для процесса в пространстве скоростей имеет порядок величины $\tau \sim \frac{\lambda}{\bar{v}}$, где $\lambda$ — длина свободного пробега. Пусть в начальный момент времени $t=0$ задано произвольное распределение частиц в пространстве $\varphi(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{v}, t)$. За время порядка $\tau$ в каждой точке пространства распределение молекул по скоростям приближается к локально максвелловскому, так что

$$\varphi(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{v}, t) \to f^{(0)}(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{v}, t).$$

При этом плотность газа $N$ и его температура $T$ еще не успевают принять равновесных значений во всем газе, а макроскопическое движение его частей (если оно имело место в начальный момент) не успевает затухнуть. Чтобы подчеркнуть это обстоятельство, мы помимо аргумента $\boldsymbol{v}$ выписали в $f^{(0)}$ параметры $\boldsymbol{r}$ и $t$. Изменение во времени переменных $N$, $T$ и $\boldsymbol{u}$ описывается макроскопическими переменными и характеризуется макроскопическим временем $\tau_{\text{macro}}$. Это время релаксации $\tau_{\text{macro}}$ порядка $\frac{L}{c}$, где $L$ — размер макроскопической системы, а $c$ — скорость распространения возмущений в газе. Как будет показано в § 26, это не что иное, как скорость звука. Таким образом,

$$f^{(0)} \to f^{(\text{М-Б})} \quad \text{при} \quad t \approx \tau_{\text{macro}}.$$

Следует подчеркнуть, что, в отличие от распределения Максвелла — Больцмана, локальное распределение Максвелла никогда не является точным, а лишь приближенно описывает распределение по скоростям в ограниченном объеме газа.

Оно является точным решением уравнения Больцмана только для скорости, даваемой формулой (20,19), и плотности удовлетворяющей уравнению (20,14). Для других значений $\boldsymbol{u}$, $T$ и $N(\boldsymbol{r})$, $f^{(0)}$ представляет приближенное решение уравнения Больцмана (см. следующий параграф), справедливое за промежутки времени $\tau$, в течение которых макроскопические величины $\boldsymbol{u}$, $T$ и $N$ не успевают изменяться, и их можно считать просто константами.

## § 21. Общая теория решения уравнения Больцмана

Полученные в §17—19 результаты не были связаны с получением явных решений уравнения Больцмана. Как мы подчеркивали, решение уравнения Больцмана сталкивается с очень большими трудностями, как математического, так и физического

характера. Последние связаны с тем, что фактически вид функции $\sigma(v^{\text{отн}}, \alpha)$ для молекулярных столкновений неизвестен и поэтому сама задача интегрирования уравнения Больцмана является несколько неопределенной. На практике всегда рассматриваются некоторые упрощенные модели, для которых межмолекулярное взаимодействие может быть представлено тем или иным достаточно простым законом в зависимости от расстояния между частицами.

Наиболее простыми и часто рассматриваемыми моделями являются модели частиц твердых шариков или частиц, взаимодействующих по закону типа $\frac{1}{r^n}$. Эти законы взаимодействия в достаточной мере произвольны и их выбор определяется главным образом простотой соответствующих формул для сечения рассеяния. Использование этих моделей отвечает переходу от реальной газовой системы к некоторой модельной системе. Однако и для модельной газовой системы решение уравнения Больцмана все еще сопряжено с преодолением расчетных трудностей. В настоящее время разработан ряд методов его решения. Мы остановимся лишь на важнейших из них.

Самым эффективным методом получения общего решения уравнения Больцмана является метод моментов.

Под моментами понимают функции вида

$$M^{(0)} = \int f\, d\boldsymbol{v}, \tag{21,1}$$

$$M_i^{(1)} = \int v_i f\, d\boldsymbol{v}, \tag{21,2}$$

$$M_{ij}^{(2)} = \int v_i v_k f\, d\boldsymbol{v}, \tag{21,3}$$

$$M_{ijk}^{(3)} = \int v_i v_k v_j f\, d\boldsymbol{v}, \tag{21,4}$$

$$\cdots\cdots\cdots\cdots$$

$$M_{i\ldots}^{(N)} = \int v_i \ldots v_N f\, d\boldsymbol{v}. \tag{21,5}$$

Моментами являются такие важные величины, как плотность, средняя скорость частиц, потоки импульса и энергии, например,

$$\rho = NmM^{(0)}, \tag{21,6}$$

$$u_i = \int v_i f\, d\boldsymbol{v} = M_i^{(1)}, \tag{21,7}$$

$$j_i = m \int (v_i - u_i) f\, d\boldsymbol{v} = m\left(M_i^{(1)} - u_i M^{(0)}\right), \tag{21,8}$$

$$\sigma_{ik} = mN\left(M_{ij}^{(2)} - u_i u_k M^{(0)}\right), \tag{21,9}$$

$$q_i = \frac{mN}{2} \int v_i v^2 f\, d\boldsymbol{v} = \frac{mN}{2} M_{ijj}^{(3)}. \tag{21,10}$$

Идея метода моментов заключается в следующем: представим решение уравнения Больцмана в виде ряда по ортогональным полиномам. В качестве таких полиномов естественно выбрать полиномы Эрмита — Сонина (§ 10 ч. V), которые удобно записать в виде

$$H^{(m)}_{ijkl}\ldots = \frac{(-1)^N}{f^{(0)}} \frac{\partial^m f^{(0)}}{\partial v_i\, \partial v_j \ldots}. \qquad (21,11)$$

Таким образом,

$$H^{(0)} = 1,$$

$$H^{(1)}_i = \left(\frac{m}{kT}\right)^{1/2} v_i,$$

$$H^{(2)}_{ik} = \left(\frac{m}{kT}\right) v_i v_k - \delta_{ik},$$

$$\cdots\cdots\cdots\cdots$$

Полиномы Эрмита — Сонина ортогональны с весом $f^{(0)}$:

$$\int f^{(0)} H^{(m)} H^{(m')}\, dv = 0 \quad \text{при} \quad m \neq m'.$$

Представим функцию распределения в виде ряда

$$f = f^{(0)}\left(1 + c^{(1)}_i H^{(1)}_i + c^{(2)}_{ik} H^{(2)}_{ik} + \ldots\right) \qquad (21,12)$$

с коэффициентами $c^{(1)}_i, \ldots, c^{(N)}_{ik}$, зависящими от координат и времени. Простое вычисление показывает, что коэффициенты этого ряда выражаются через моменты. Используя ортогональность полиномов Эрмита, легко найти, что

$$c^{(1)}_i = \frac{u_i}{\sqrt{\frac{kT}{m}}}; \qquad c^{(2)}_{ik} = \frac{\sigma_{ik}}{NkT}; \ \ldots \qquad (21,13)$$

Умножая уравнение Больцмана на полиномы Эрмита $H^{(m)}$ и интегрируя его по скоростям, имеем (в отсутствии внешних сил):

$$\int H^{(m)}_{ijk\ldots}\left(\frac{\partial f}{\partial t} + v_k \frac{\partial f}{\partial x_k}\right) dv = \int H^{(m)}_{ijk\ldots} I\, dv. \qquad (21,14)$$

Подставляя затем в (21,14) разложение (21,12) и пользуясь условиями ортогональности, приходим к уравнению для коэффициентов $c^{(m)}_{ij\ldots}$. Поскольку коэффициенты $c^{(m)}_{ij\ldots}$ могут быть выражены через моменты $M^{(m)}_{ij}\ldots$, то эту систему можно представить в виде бесконечной системы дифференциальных уравнений. Эти уравнения имеют вид

$$\frac{\partial M^{(m)}_{ijk\ldots}}{\partial t} + \sum_k \frac{\partial}{\partial x_k} M^{(m)}_{ijk\ldots} = \int v_i v_j v_k \ldots I\, dv. \qquad (21,15)$$

Для специальной модели взаимодействия, когда взаимодействие между молекулами аппроксимируется силами отталкивания, обратно пропорциональными пятой степени рассеяния (так называемые максвелловские молекулы), бесконечный ряд обрывается и сводится к конечному числу уравнений. Однако для более реалистических моделей такого упрощения не возникает. Тем не менее важность метода моментов заключается в том, что он, в принципе, позволяет найти замкнутую систему уравнений относительно макроскопических величин (моментов), эквивалентную уравнению Больцмана. Точное решение этой системы было бы равноценно точному решению уравнения Больцмана. Для реальных расчетов функцию распределения приходится аппроксимировать конечным числом членов в разложении (21,12).

Чаще всего ограничиваются членами третьего порядка. При этом удобнее всего ограничиться теми моментами, которые имеют непосредственный смысл. Такими являются первые тринадцать моментов $-M^{(0)}$, $M_i^{(1)}$, $M_{ik}^{(2)}$, $M_{ikj}^{(3)}$, через которые выражаются плотность, поток импульса и энергии. В этом так называемом тринадцатимоментном приближении функция распределения имеет вид

$$f=f_0\left[\left(1+\frac{\sigma_{ik}}{2N}\frac{v_iv_k}{(kT)^2}-\frac{q_kv_k}{mN}\left(\frac{m}{kT}\right)^2\left(1-\frac{mv^2}{5kT}\right)\right]\cdot \qquad (21,16)$$

Таким образом, в разложение (21,16) входят коэффициенты $\sigma_{ik}$ и $q_k$, зависящие, вообще говоря, от координат и времени.

Подставляя приближенное значение $f$ по формуле (21,16) в (21,14), можно прийти к системе уравнений для этих коэффициентов. Достоинством этой системы является то, что неизвестные коэффициенты являются непосредственно измеряемыми величинами.

Для повышения степени точности можно увеличить число членов ряда, которые удерживаются в аппроксимирующем функцию распределении $f$ выражении[1]). Мы не можем останавливаться на этих громоздких вычислениях, тем более, что все они относятся к не обоснованным моделям газам с произвольно задаваемым сечением рассеяния $\sigma(v_{\text{отн}};\ \alpha)$.

Уравнение Больцмана допускает существенное упрощение в двух важных случаях:

1) если мы интересуемся изменениями состояния газа за промежутки времени $\Delta t > \tau_{\text{micro}}$;

2) если газ как целое находится в состоянии, близком к равновесному.

В первом случае можно считать, что в каждой точке газа за время $t < \Delta t$ установилось распределение по скоростям, близ-

---

[1]) М. Коган, Динамика разреженного газа, «Наука», 1967.

кое к локально максвелловскому распределению $f^{(0)}$. Тогда для времен $t > \Delta t$ можно пытаться искать решение уравнения Больцмана в виде

$$f(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{v}, t) \simeq f^{(0)}(\boldsymbol{v}, \boldsymbol{r}, t)[1 + \varphi(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{v}, t)], \tag{21,17}$$

где $\varphi f^{(0)}$ — малое изменение функции $f^{(0)}$, т. е. $\varphi \ll 1$.

Функция $\varphi$ описывает эволюцию газа за времена, большие по сравнению с $\tau_{\text{micro}}$. Этот метод (носящий название метода Чэпмена — Энскога) позволяет описывать макроскопическое поведение газа, например, вычислить потоки импульса или тепла в газе.

Если газ находится в состоянии, близком к равновесному, то можно положить

$$f(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{v}, t) \cong f^{(\mathrm{M})}(v)[1 + \varphi(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{v}, t)], \tag{21,18}$$

где $f^{(\mathrm{M})}(v)$ — равновесное максвелловское распределение и $\varphi \ll 1$. Подобная аппроксимация имеет смысл, если к первоначально равновесному газу прикладываются малые возмущения.

В этом параграфе мы ограничимся изложением общей теории. Примеры применения общей теории будут даны ниже.

В обоих случаях уравнение Больцмана линеаризуется. Мы начнем с первого случая.

При подстановке (21,17) в уравнение Больцмана следует сохранить только величины первого порядка малости. При этом скорость $v_i$ и силы $F_i$, вызывающие отклонение от равновесного локального распределения, следует считать малыми величинами первого порядка. Поэтому подстановка (21,17) в левую часть уравнения Больцмана дает

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} + v_k \frac{\partial f^{(0)}}{\partial x_k} + \frac{F_k}{m} \frac{\partial f^{(0)}}{\partial v_k}. \tag{21,19}$$

В операторе столкновений можно написать

$$[f_2 f_3 - f f_1] \simeq f_2^{(0)} f_3^{(0)} (1 + \varphi_2 + \varphi_3) - f^{(0)} f_1^{(0)} (1 + \varphi + \varphi_1) \simeq$$
$$\simeq f^{(0)} f_1^{(0)} (\varphi_2 + \varphi_3 - \varphi - \varphi_1). \tag{21,20}$$

Поэтому окончательно приходим к уравнению

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} + v_k \frac{\partial f^{(0)}}{\partial x_k} + \frac{F_k}{m} \frac{\partial f^{(0)}}{\partial v_k} =$$
$$= f^{(0)} \int \sigma v_{\text{отн}} f_1^{(0)} (\varphi_2 + \varphi_3 - \varphi_1 - \varphi)\, d\boldsymbol{v}_1\, d\boldsymbol{\Omega}. \tag{21,21}$$

Полученное уравнение является линейным неоднородным интегро-дифференциальным уравнением относительно функции $\varphi(x_k, v_k, t)$.

В § 22 будет проведено решение уравнения (21,21). Здесь мы укажем лишь на важное свойство неоднородного интегрального уравнения (21,21).

Запишем его в сокращенном операторном виде

$$\hat{L}\varphi = A, \tag{21,22}$$

где $A$ — известная функция и $L$ — линейный самосопряженный интегральный оператор.

Для того чтобы не писать громоздких формул, мы запишем $\hat{L}\varphi$ в символическом виде

$$\hat{L}\varphi = \int w(v, v_1)(\varphi_1 - \varphi)\, d\boldsymbol{v}_1, \tag{21,23}$$

причем

$$w(v, v_1) = w(v_1, v).$$

Умножая (21,23) на произвольную функцию $\psi(\boldsymbol{v})$ и интегрируя по $d\boldsymbol{v}$, находим

$$\int \psi(v)\hat{L}\varphi(v_1)\, d\boldsymbol{v} = \int \psi(v)\, w(v, v_1)[\varphi_1(\boldsymbol{v}_1) - \varphi(\boldsymbol{v})]\, d\boldsymbol{v}\, d\boldsymbol{v}_1. \tag{21,24}$$

Кроме того, можно написать

$$\int \psi(v_1)\hat{L}\varphi(v)\, d\boldsymbol{v}_1 = \int \psi(\boldsymbol{v}_1)\, w(v_1, v)[\varphi(\boldsymbol{v}) - \varphi_1(\boldsymbol{v}_1)]\, d\boldsymbol{v}\, d\boldsymbol{v}_1 =$$

$$= -\int \psi(\boldsymbol{v})\, w(v, v_1)[\varphi_1(\boldsymbol{v}_1) - \varphi(\boldsymbol{v})]\, d\boldsymbol{v}\, d\boldsymbol{v}_1. \tag{21,25}$$

Сравнивая (21,24) и (21,25), перепишем (21,24) в симметричном виде

$$\int \psi\hat{L}\varphi\, d\boldsymbol{v} = \frac{1}{2}\int (\varphi - \varphi_1)(\psi - \psi_1)\, w\, d\boldsymbol{v}_1\, d\boldsymbol{v}. \tag{21,26}$$

Поменяв местами $\varphi$ и $\psi$, находим

$$\int \psi\hat{L}\varphi\, d\boldsymbol{v} = \int \varphi\hat{L}\psi\, d\boldsymbol{v}. \tag{21,27}$$

Таким образом, $\hat{L}$ является самосопряженным оператором. В частном случае, когда $\psi = \varphi$, (21,26) дает

$$\int \varphi\hat{L}\varphi\, d\boldsymbol{v} = \frac{1}{2}\int (\varphi - \varphi_1)^2\, w\, d\boldsymbol{v}\, d\boldsymbol{v}_1 \geqslant 0, \tag{21,28}$$

поскольку всегда $w(v, v_1) \geqslant 0$.

Рассмотрим две функции — функцию $\varphi$, удовлетворяющую уравнению (21,23) и одновременно уравнению

$$\int \varphi\hat{L}\varphi\, d\boldsymbol{v} = \int \varphi A\, d\boldsymbol{v} \tag{21,29}$$

и функцию $\psi$, удовлетворяющую только интегральному соотношению

$$\int \psi\hat{L}\psi\, dv = \int \psi A\psi\, dv, \tag{21,30}$$

но не являющуюся решением уравнения (21,23).

Тогда легко показать, что имеет место неравенство

$$\int \varphi\hat{L}\varphi\, dv \geqslant \int \psi\hat{L}\psi\, dv. \tag{21,31}$$

Это неравенство означает, что решение линеаризованного интегрального уравнения Больцмана отвечает максимуму интеграла $\int \varphi\hat{L}\varphi\, dv$ по сравнению со всеми функциями удовлетворяющими условию (21,30).

Для доказательства (21,31) напишем положительную [в силу (21,28)] величину

$$\int (\varphi-\psi)\hat{L}(\varphi-\psi)\, dv = \int \varphi\hat{L}\varphi\, dv + \int \psi\hat{L}\psi\, dv - \int \varphi\hat{L}\psi\, dv - \int \psi\hat{L}\varphi dv = \int \varphi\hat{L}\varphi\, dv + \int \psi\hat{L}\psi\, dv - 2\int \psi\hat{L}\varphi\, dv \geqslant 0,$$

где мы воспользовались (21,27).

Пользуясь (21,22) и (21,30), находим

$$\int (\varphi-\psi)\hat{L}(\varphi-\psi)\, dv = \int \varphi\hat{L}\varphi\, dv - \int \varphi\hat{L}\psi\, dv \geqslant 0.$$

Отсюда следует доказываемое нами неравенство (21,31).

Экстремальные свойства решений интегрального уравнения (21,21) позволяют для их нахождения применить обычные методы вариационного исчисления, выбирая $\varphi$ в виде линейной комбинации известных функций $g_i$:

$$\varphi = \sum \alpha_i g_i.$$

Подбирая их коэффициенты так, чтобы $\varphi$ имело максимальное значение, можно найти функцию, достаточно близкую к истинному решению.

Второй случай линеаризации уравнения Больцмана получается при подстановке (21,18). Поскольку максвелловское распределение автоматически удовлетворяет уравнению Больцмана, сразу получаем

$$\frac{\partial\varphi}{\partial t} + v_k\frac{\partial\varphi}{\partial x_k} + \frac{F_k}{m}\frac{\partial\varphi}{\partial v_k} = \int \sigma v_{\text{отн}} f^{\text{M}}(v_1)[\varphi_2+\varphi_3-\varphi-\varphi_1]\, dv_1\, d\Omega. \tag{21,32}$$

Мы приходим к однородному линейному интегро-дифференциальному уравнению вида

$$\frac{\partial \varphi}{\partial x_i} = \hat{L}\varphi. \qquad (21,32')$$

Его решение может быть легко найдено, если известно решение однородного интегрального уравнения

$$\hat{L}\varphi_i^{(0)} = \lambda_i \varphi_i^{(0)}, \qquad (21,33)$$

где $\lambda_i$ — собственные значения и $\varphi_i^{(0)}$ — собственные (ортогональные и нормированные) функции оператора $\hat{L}$.

Решение (21,32) может быть представлено в виде разложения по системе функций

$$\varphi = \sum \alpha_i \varphi_i^{(0)}. \qquad (21,34)$$

При этом предполагается, что спектр функций $\varphi_i^{(0)}$ имеет дискретный характер. Пример использования этого метода будет дан в § 25 и 26.

Заметим лишь, что первые пять собственных значений уравнения (21,33) могут быть указаны сразу.

Именно, поскольку функции

$$\varphi = 1, \qquad \varphi = \boldsymbol{v}, \qquad \varphi = \frac{mv^2}{2}$$

обращают в нуль оператор столкновений и не зависят от $x_i$ явно, они являются собственными функциями уравнения (21,33), которые отвечают собственным значениям оператора $\hat{L}$.

## § 22. Уравнения гидродинамики, вязкость и теплопроводность газов

Мы видели, что кинетическое уравнение Больцмана позволяет получить, как следствие, законы механики сплошных сред. Однако фактическое нахождение тензора напряжений $\sigma_{ik}$ требует значения функции распределения $f$.

Мы перейдем к вычислению неравновесной функции распределения в идеальном газе, совершающем макроскопическое движение.

Мы будем предполагать, что скорость макроскопического движения газа $\boldsymbol{u}$ изменяется от точки к точке. Примем, однако, что это изменение является достаточно медленным. Под медленным пространственным изменением скорости $\boldsymbol{u}$ мы понимаем следующее: объемы газа с пространственной протяженностью порядка нескольких длин свободного пробега можно считать движущимися с общей постоянной скоростью. При этом, как

это было сказано в § 20, в таких объемах устанавливается локальное максвелловское распределение. Скорости движения разных объемов газа являются различными, так что $\boldsymbol{u} = \boldsymbol{u}(\boldsymbol{r}, t)$.

Мы ограничимся изотермическим режимом движения газа, так что температура во всем объеме газа является постоянной. Считая локальное равновесие установившимся, подставим в выражение для тензора напряжений $\sigma_{ik}$ и потока тепла $q_k$ значение $f^{(0)}$.

Формула (18,12) дает

$$\sigma_{ik} = mN \int (v_i - u_i)(v_k - u_k) f^{(0)}\, d\boldsymbol{v} = \\ = \rho\,\overline{(v_i - u_i)(v_k - u_k)} = NkT\delta_{ik} = p\delta_{ik}. \quad (22,1)$$

Таким образом, тензор напряжений сводится к нормальному давлению. Аналогично, из (18,17) находим $q_k = 0$. В этом приближении уравнения (18,9) и (18,14) сплошной среды приобретают вид

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_k}(\rho u_k) = 0, \quad (22,2)$$

$$\rho\left(\frac{\partial u_i}{\partial t} + u_k \frac{\partial u_i}{\partial x_k}\right) = -\frac{\partial p}{\partial x_k}. \quad (22,3)$$

Уравнение (22,3) носит название уравнения Эйлера. Как известно, (22,3) является уравнением движения идеальной жидкости.

Уравнение для энтропии единицы объема (19,1) запишется в виде

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{\partial j_k^s}{\partial x_k} = 0. \quad (22,4)$$

Последнее уравнение показывает, что при движении жидкости ее удельная энтропия остается постоянной, т. е. процесс перемещения имеет адиабатический характер.

В этом приближении сплошную среду можно рассматривать как идеальную жидкость с уравнением состояния

$$p = NkT. \quad (22,5)$$

Совокупность уравнений (22,2)—(22,5) полностью определяет движение газа в приближении сплошной среды. Для получения уравнений гидродинамики реального (вязкого) газа в том же приближении, будем пытаться искать решение уравнения Больцмана по методу последовательных приближений Чэпмена — Энскога. Именно, положим,

$$f = f^{(0)}(1 + \varphi), \quad (22,6)$$

где $\varphi \ll 1$, и $f^{(0)}$ — локально равновесное распределение.

Для краткости выкладок будем считать газ изотермическим и несжимаемым, внешние силы отсутствующими и давление постоянным[1]).

Средняя скорость $u_i$ газа может зависеть как от координат, так и от времени. Подставляя (22,6) в уравнение Больцмана и ограничиваясь величинами первого порядка малости, находим

$$\frac{\partial f^{(0)}}{\partial t} + v_k \frac{\partial f^{(0)}}{\partial x_k} = f^{(0)} I(\varphi), \tag{22,7}$$

где

$$I(\varphi) = \int f_1^{(0)} v_{\text{отн}} \sigma \left[\varphi_2 + \varphi_3 - \varphi - \varphi_1\right] d\boldsymbol{v}_1\, d\Omega. \tag{22,8}$$

В левой части мы опустили члены, пропорциональные $\varphi$, поскольку производные от $f^{(0)}$ сами по себе являются величинами первого порядка малости.

Вычислим производные в левой части (22,7), пользуясь выражением (20,8) для $f^{(0)}$. Поскольку $N$ и $T$ — постоянные величины, имеем

$$\frac{\partial f^{(0)}}{\partial t} + v_k \frac{\partial f^{(0)}}{\partial x_k} = \frac{m}{kT}(v_i - u_i) f^{(0)} \frac{\partial u_i}{\partial t} + \frac{m}{kT}(v_i - u_i) f^{(0)} v_k \frac{\partial u_i}{\partial x_k}.$$

Для $\frac{\partial u_i}{\partial t}$ можно воспользоваться приближением идеальной жидкости, т. е. в силу (22,3) написать

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} = -u_k \frac{\partial u_i}{\partial x_k}.$$

Поэтому окончательно

$$\frac{\partial f^{(0)}}{\partial t} + v_k \frac{\partial f^{(0)}}{\partial x_k} = \frac{m}{kT}(v_i - u_i)(v_k - u_k) f^{(0)} \frac{\partial u_i}{\partial x_k}. \tag{22,9}$$

В несжимаемой жидкости $\frac{\partial u_k}{\partial x_k} = 0$ и можно вместо (22,9) написать

$$\frac{\partial f^{(0)}}{\partial t} + v_k \frac{\partial f^{(0)}}{\partial x_k} = \frac{m}{kT}\left(V_i V_k - \frac{V^2 \delta_{ik}}{3}\right)\left(\frac{\partial u_i}{\partial x_k} + \frac{\partial u_k}{\partial x_i}\right) f^{(0)}. \tag{22,10}$$

Обозначим через $U_{ik}$ тензор скорости деформаций:

$$U_{ik} = \frac{\partial u_i}{\partial x_k} + \frac{\partial u_k}{\partial x_i}.$$

---

[1]) Этому отвечает, например, движение газа между двумя плоскостями, движущейся и неподвижной.

Тогда уравнение Больцмана приобретает вид

$$\frac{m}{kT}\left(V_iV_k - \frac{V^2\delta_{ik}}{3}\right)U_{ik}f^{(0)} = f^{(0)}\int f_1^{(0)}v_{\text{отн}}\sigma\left[\varphi_2+\varphi_3-\varphi_1-\varphi\right]d\boldsymbol{v}_1\,d\boldsymbol{\Omega}. \tag{22,11}$$

Функция $\varphi(v)$ помимо уравнения (22,11) должна удовлетворять дополнительным условиям, выражающим постоянство числа частиц, импульса и энергии газа как целого:

$$\int f\,d\boldsymbol{v} = \int f^{(0)}\,d\boldsymbol{v} = N,$$

$$mN\int f\boldsymbol{V}\,d\boldsymbol{v} = \boldsymbol{P} = Nm\int f^{(0)}\boldsymbol{V}\,d\boldsymbol{v} = \text{const},$$

$$E = \frac{mN}{2}\int fV^2\,d\boldsymbol{v} = \frac{mN}{2}\int f^{(0)}V^2\,d\boldsymbol{v} = \text{const}.$$

Отсюда следуют равенства

$$\int f^{(0)}\varphi\,d\boldsymbol{v} = 0, \tag{22,12}$$

$$Nm\int f^{(0)}V_i\varphi\,dv = 0, \tag{22,13}$$

$$\frac{mN}{2}\int f^{(0)}V^2\varphi\,d\boldsymbol{v} = 0. \tag{22,14}$$

Нетрудно заметить, что выполнение этих пяти уравнений является необходимым условием существования решений неоднородного интегрального уравнения (22,11).

Действительно, если однородное интегральное уравнение $I(\varphi) = 0$ имеет решение $\varphi = \chi(\boldsymbol{v})$, то неоднородное уравнение

$$I(\varphi) = A\varphi \tag{22,15}$$

имеет решение только при выполнении условий ортогональности

$$\int \chi(\boldsymbol{v})\,\varphi\,d\boldsymbol{v} = 0. \tag{22,16}$$

Решениями однородного интегрального уравнения служат, например, функции

$$\chi_1 = e^{-\alpha V^2}; \qquad \boldsymbol{\chi}_2 = \boldsymbol{V}e^{-\alpha V^2}; \qquad \chi_3 = V^2e^{-\alpha V^2}.$$

Ясно, что соотношения (22,12)—(22,14) выражают необходимые условия ортогональности.

Из структуры интегрального уравнения (22,11) видно, что его решение нужно пытаться искать в виде

$$\varphi = \psi_{ik}\left(\frac{\partial u_i}{\partial x_k} + \frac{\partial u_k}{\partial x_i}\right) = \psi_{ik}U_{ik}. \tag{22,17}$$

При подстановке (22,17) в (22,11) величина $U_{ik}$ в обеих частях уравнения сократится. Это значит, что решение (22,17) справедливо при всех значениях тензора скорости деформаций, как это и должно быть.

При этом тензор $\psi_{ik}$ является симметричным. Можно также считать, что всегда $\psi_{ii}=0$, поскольку при $i=k$ всегда $U_{ii}=0$ и $\varphi=0$. Подставляя (22,17) в (22,11), находим

$$\frac{m}{kT}\left(V_iV_k-\frac{V^2\delta_{ik}}{3}\right)=\int f_1^{(0)}\sigma v_{\text{отн}}\left[\psi_{ik}^{(2)}+\psi_{ik}^{(3)}-\psi_{ik}^{(1)}-\psi_{ik}\right]d\boldsymbol{v}_1\,d\boldsymbol{\Omega}. \quad (22,18)$$

В этом уравнении левая часть не зависит от средней скорости, следовательно, функция $\psi_{ik}$ зависит только от компонент относительной скорости $V_i$.

Очевидно, что при изменении тензора $\left(V_iV_k-\frac{V^2\delta_{ik}}{3}\right)$, например, при вращении в пространстве скоростей, уравнение (22,18) не должно нарушаться. Отсюда следует, что для $\psi_{ik}$ следует написать выражение

$$\psi_{ik}=a(V)\left(V_iV_k-\frac{V^2}{3}\delta_{ik}\right), \quad (22,19)$$

удовлетворяющее указанному требованию. Здесь $a(V)$ — некоторая скалярная функция скалярного аргумента $V$. Явный вид этой функции получается из решения интегрального уравнения (22,18). Для фактического получения решения необходимо знать зависимость эффективного сечения от скорости и углов. Для реальных молекул, даже одноатомных, вид этой функции не известен. Общее представление о характере решений можно получить, если рассмотреть простейший, хотя и не реалистический случай, когда $v_{\text{отн}}\sigma(v_{\text{отн}},\alpha)$ зависит только от угла рассеяния $\alpha$, но не зависит от скорости.

При этом уравнение (22,18) приобретает вид

$$\frac{m}{kT}\left(V_iV_k-V^2\frac{\delta_{ik}}{3}\right)=$$
$$=\left(\frac{m}{2\pi kT}\right)^{3/2}N\int e^{-\frac{mV_1^2}{2kT}}\sigma\,v_{\text{отн}}\left[\psi_{ik}^{(3)}+\psi_{ik}^{(2)}+\psi_{ik}^{(1)}-\psi_{ik}\right]d\boldsymbol{\Omega}\,d\boldsymbol{v}_1. \quad (22,20)$$

Нетрудно видеть, что интегральный член справа обладает важной особенностью: если функция, стоящая в квадратных скобках, является полиномом, то и интеграл от нее также является полиномом.

Если, в соответствии с нашей упрощенной моделью, принять, что величина

$$g=v_{\text{отн}}\sigma(\alpha,\,v_{\text{отн}})$$

не зависит от скорости, то уравнению (22,20) можно пытаться удовлетворить функцией

$$\psi_{ik} = -\frac{8}{3\sigma N}\left(\frac{m}{2kT}\right)^{3/2}\left(V_i V_k - \frac{V^2}{3}\delta_{ik}\right), \qquad (22,21)$$

в чем проще всего убедиться непосредственной подстановкой.

Легко видеть, что функция (22,21) удовлетворяет условиям ортогональности.

Соответственно, функция распределения в первом приближении приобретает вид

$$f = f^{(0)}\left[1 - \frac{8}{3}\left(\frac{m}{2kT}\right)^{3/2}\frac{1}{N\sigma}\left(V_i V_k - \frac{V^2}{3}\delta_{ik}\right) U_{ik}\right]. \qquad (22,22)$$

С помощью этой функции распределения можно найти явное выражение для тензора напряжений, что и является нашей конечной целью.

Подставляя в (18,12) функцию распределения из (22,22) и вычисляя интеграл, находим

$$\sigma_{ik} = -p\delta_{ik} + \frac{4m}{3\sigma}\left(\frac{2kT}{m}\right)^{1/2}\left(\frac{\partial u_i}{\partial x_k} + \frac{\partial u_k}{\partial x_i}\right). \qquad (22,23)$$

Согласно (8,12) $\sigma_{ik}$ выражается через тензор $U_{ik}$ и вязкость $\eta$.

Сравнивая (8,12) и (22,23), мы приходим к выражению для вязкости идеального газа [в нашей модели $g = g(\alpha)$]:

$$\eta = \frac{2}{3}\frac{m}{\sigma}\left(\frac{2kT}{m}\right)^{1/2}. \qquad (22,24)$$

В так называемой модели твердых шариков, в которой принимается, что сечение $\sigma$ равно геометрической площади сечения сферы, для вязкости получается аналогичное выражение. Формула (22,24) качественно согласуется с опытными данными, хотя, разумеется, она не может претендовать на количественный смысл. Согласие формулы (22,24) с опытом связано, по-видимому, со слабой зависимостью функции распределения $\varphi$ от закона межмолекулярного взаимодействия. Заметим, что вязкость газа оказывается не зависящей от плотности.

В общем случае, не конкретизируя вида сечения, можно написать для $\eta$:

$$\eta = -mN\int (v_i - u_i)(v_k - u_k) f^{(0)}\psi_{ik}\, d\boldsymbol{v},$$

где $\psi_{ik}$ выражается формулой (22,19).

Вязкость — первый из вычисленных нами кинетических коэффициентов. Пользуясь выражением (22,23) для $\sigma_{ik}$ и подставляя его в (18,14), можно написать

$$\rho\left(\frac{\partial u_i}{\partial t} + u_k\frac{\partial u_i}{\partial x_k}\right) = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \eta\frac{\partial^2 u_i}{\partial x_k^2} + f_i \qquad (22,25)$$

или, в векторном виде,

$$\rho \frac{\partial u}{\partial t} = -\operatorname{grad} p + \eta \Delta u + f. \qquad (22,25')$$

Полученное уравнение представляет уравнение Навье — Стокса. Напомним, что оно описывает движение вязкой несжимаемой жидкости и применимо как к случаю сравнительно разреженных газов, так и капельных жидкостей.

Предыдущее рассмотрение показывает, что уравнение Навье — Стокса может быть получено теоретически для случая достаточно разреженных газов, причем вязкость $\eta$ также может быть вычислена, по крайней мере с точностью до числового коэффициента. Мы не останавливаемся на аналогичных вычислениях для сжимаемого газа[1]).

Совершенно аналогичным образом может быть вычислен поток тепла в термически неоднородном газе.

Считая температуру газа $T$ изменяющейся от точки к точке в газе, а газ не совершающим макроскопического движения, снова будем пытаться искать решение уравнения Больцмана по методу Чэпмена — Энскога в виде (22,6). При этом в локально равновесном распределении $f^{(0)}$ среднюю скорость $u_i$ положим равной нулю, таким образом,

$$f^{(0)} = N(x_k)\left(\frac{m}{2\pi kT}\right)^{3/2} e^{-\frac{mv^2}{2kT}} = e^{\frac{\mu - \frac{mv^2}{2}}{kT}}. \qquad (22,26)$$

Здесь химический потенциал $\mu$ и температура $T$ изменяются от точки к точке, т. е. зависят от координат $x_k$. Для того чтобы можно было пользоваться методом Чэпмена — Энскога, необходимо, однако, считать это изменение достаточно медленным. Количественный критерий того, что́ можно считать медленным изменением, мы сформулируем ниже. Введение парциального потенциала $\mu$ в локально равновесном распределении связано со следующим простым соображением: в неизотермическом газе число частиц в 1 *см*$^3$, так же как и температура, изменяется от точки к точке. Если, однако, газ неподвижен, то давление в нем должно быть постоянным. В противном случае механическое равновесие было бы невозможным и в газе началось бы макроскопическое движение.

Если записать локально равновесное распределение в виде (22,6) и считать парциальный потенциал $\mu$ функцией давления и температуры $\mu = \mu(T, p)$, то $\mu$ будет зависеть от координат только через посредство температуры.

---

[1]) См., например, Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, Механика сплошных сред, Гостехиздат, 1944.

Функция $f$ удовлетворяет уравнению (22,7). Вычислим его левую часть, пользуясь (22,26). Имеем, очевидно,

$$v_k \frac{\partial f^{(0)}}{\partial x_k} = v_k \frac{\partial f^{(0)}}{\partial T} \frac{\partial T}{\partial x_k} = v_k \frac{\partial T}{\partial x_k} f^{(0)} \left[ \frac{1}{kT} \left( \frac{\partial \mu}{\partial T} \right) - \frac{\mu}{kT^2} + \frac{mv^2}{2kT^2} \right] =$$

$$= v_k \frac{\partial T}{\partial x_k} f^{(0)} \left[ -\frac{s}{kT} - \frac{h - sT}{kT^2} + \frac{mv^2}{2kT^2} \right] =$$

$$= -v_k \frac{\partial T}{\partial x_k} f^{(0)} \frac{\left( h - \frac{mv^2}{2} \right)}{kT^2} = -v_k \frac{\partial T}{\partial x_k} \frac{1}{T} \left( \frac{5}{2} - \frac{mv^2}{2kT} \right) \cdot f^0, \quad (22,27)$$

где $h$ — теплосодержание, отнесенное на одну молекулу. Поэтому уравнение (22,8) приобретает вид [аналогично (22,11)]

$$-v_k f^{(0)} \frac{1}{T} \left( \frac{5}{2} - \frac{mv^2}{2kT} \right) \frac{\partial T}{\partial x_k} = f^{(0)} \int f_1^{(0)} \sigma v_{\text{отн}} [\varphi_2 + \varphi_3 - \varphi_1 - \varphi] \, d\boldsymbol{v}_1 \, d\boldsymbol{\Omega}. \quad (22,28)$$

При этом функция $\varphi$ по-прежнему должна удовлетворять условиям (22,12)—(22,14).

Из вида уравнения (22,28) ясно, что его решение следует пытаться искать в виде

$$\varphi = \zeta_k \frac{\partial T}{\partial x_k}, \quad (22,29)$$

где вектор $\zeta_k$ зависит от скорости $\boldsymbol{v}$.

Подставляя (22,28) в (22,29), мы убеждаемся, что решение (22,29) имеет место при всех значениях градиента температуры $\frac{\partial T}{\partial x_k}$, выпадающего из уравнения.

При этом получаем

$$-f^{(0)} \frac{\boldsymbol{v}}{T} \left( \frac{5}{2} - \frac{mv^2}{2kT} \right) = \int f_1^{(0)} \sigma v_{\text{отн}} [\zeta_3 + \zeta_2 - \zeta_1 - \zeta] \, d\boldsymbol{v}_1 \, d\boldsymbol{\Omega}. \quad (22,30)$$

Уравнение (22,30) представляет уравнение для определения вектора $\boldsymbol{\zeta}$. Единственной векторной величиной, входящей в (22,29), является вектор скорости $\boldsymbol{v}$. Это означает, что направление вектора $\boldsymbol{v}$ является единственным выделенным направлением в пространстве. Поэтому вектор $\boldsymbol{\zeta}$ должен быть ориентирован по этому направлению, т. е.

$$\boldsymbol{\zeta} = \alpha(v) \boldsymbol{v}, \quad (22,31)$$

где $\alpha(v)$ — скалярная функция скалярного аргумента $v$. Помимо интегрального уравнения, $\alpha(v)$ должна удовлетворять условиям ортогональности (22,12)—(22,14).

Конкретный вид скалярной функции $\alpha(v)$ зависит от вида сечения рассеяния. Если, в частности, проводить вычисление

для модели, у которой $g = v_{\text{отн}}\sigma$ зависит только от углов, то после подстановки в (22,30) нетрудно убедиться, что полином

$$\alpha(v) = -\frac{2}{N\sigma T}\left(\frac{mv^2}{2kT} - \frac{5}{2}\right)\left(\frac{m}{2kT}\right)^{1/2}$$

удовлетворяет уравнению (22,30).

Поэтому решение (22,28) имеет вид

$$f = f^{(0)}\left[1 - \left(\frac{mv^2}{2kT} - \frac{5}{2}\right)\frac{2}{\sigma NT}\left(\frac{m}{2kT}\right)^{1/2} v_k \frac{\partial T}{\partial x_k}\right].$$

Зная функцию распределения, можно найти тепловой поток

$$q_k = \frac{mN}{2}\int v_k v^2 f\, dv = -\frac{5}{2}\frac{mk}{\sigma}\left(\frac{2kT}{m}\right)^{1/2}\frac{\partial T}{\partial x_k}. \qquad (22,32)$$

Отсюда следует, что теплопроводность $\varkappa$ равна

$$\varkappa = \frac{5}{8}\frac{mk}{\sigma}\left(\frac{2kT}{m}\right)^{1/2}. \qquad (22,33)$$

Интересно отметить, что отношение

$$\frac{\varkappa}{\eta} = \frac{15}{4}k = \frac{5}{2}c_v \qquad (22,34)$$

не зависит от величины $\sigma$.

Формула (22,33), как и формула для вязкости, находится в качественном согласии с опытом. В частности, она правильно передает температурную зависимость теплопроводности. Формула (22,34) имеет количественный смысл и находится в полном согласии с экспериментом.

## § 23. Время релаксации

Рассмотрим несколько детальнее, как именно происходит переход пространственно-однородного газа, находящегося вне поля сил, в равновесное состояние.

Мы ограничимся газом, находящимся в состоянии достаточно близком к равновесному. Тогда в соответствии со сказанным в § 21 можно положить

$$f = f^{(0)}(1 + \varphi),$$

где $f^{(0)}$ — локальная равновесная функция распределения.

Уравнение Больцмана приобретает вид (21,32). В отсутствие внешнего поля в однородном газе (21,32) имеет вид

$$\frac{\partial\varphi}{\partial t} = \int f_1^{(0)}\sigma v_{\text{отн}}\left[\varphi_3 + \varphi_2 - \varphi_1 - \varphi\right] dv_1\, d\Omega. \qquad (23,1)$$

Решение этого неоднородного интегро-дифференциального уравнения можно попытаться искать в виде

$$\varphi(v, t) = \sum A_i \psi_i(v)\, e^{-\frac{t}{\tau_i(v)}}. \qquad (23{,}2)$$

Для $\psi(v)$ при этом получается линейное интегральное уравнение. Для его решения требуется задание функции $\sigma(v; \alpha)$. Мы видим, таким образом, что временна́я зависимость выражается рядом (23,2) и определяется бесконечным числом величин $\tau_i$. Сходимость этого ряда, а также существование набора дискретных величин $\tau_i$ исследована пока недостаточно полно. Однако смысл ряда (23,2) и величин $\tau_i$ вполне ясен. Равновесное распределение устанавливается за времена релаксации $\tau_i$, различные в разных интервалах скоростей.

Это значит, что максвелловское распределение скоростей в разных областях пространства скоростей будет устанавливаться за различное время. Естественно, что различные средние характеристики газа, например, средняя скорость или средняя энергия, будут иметь свои периоды релаксации.

Если, однако, в некотором грубом приближении, пренебречь этим обстоятельством и взять лишь один член ряда, написав

$$f = f^{(0)}\left(1 + \psi e^{-t/\tau}\right), \qquad (23{,}3)$$

то для $\varphi$ получаем

$$\frac{\varphi}{\tau} = -\frac{I}{f^{(0)}}. \qquad (23{,}4)$$

По порядку величины можно оценить $\tau$ как

$$\frac{1}{\tau} \simeq N\sigma\bar{v}_{\text{отн}}. \qquad (23{,}5)$$

Множитель $N$ появляется из определения среднего. Кроме того, с той же степенью точности можно написать

$$\varphi = \frac{f - f^{(0)}}{f^{(0)}} = I.$$

В этом приближении кинетическое уравнение приобретает вид

$$-\frac{\partial f}{\partial t} = \frac{f - f^{(0)}}{\tau}. \qquad (23{,}6)$$

Последнее уравнение означает, что скорость приближения $f$ к равновесию тем больше, чем больше отклонение от равновесного распределения. При достаточно малых отклонениях от равновесия закон изменения $\frac{\partial f}{\partial t}$ в форме (23,6) передает характер процесса релаксации с достаточной для ряда практических приложений степенью точности.

По-видимому, последнее обстоятельство связано с тем, что функция $f^{(0)}$ вместе с соответствующим весовым множителем имеет довольно резкий максимум.

Поэтому главный вклад в релаксационный процесс дают частицы со скоростью, близкой к средней.

Мы увидим в дальнейшем, что это особенно относится к газу фермиевских частиц.

Очень часто наряду с кинетическим уравнением (23,6) используют релаксационное приближение для получения функции распределения в общем случае пространственно-неоднородного газа, находящегося в поле сил. Именно, кинетическое уравнение представляют в виде

$$\frac{\partial f}{\partial t}+v_k\frac{\partial f}{\partial x_k}+\frac{F_k}{m}\frac{\partial f}{\partial v_k}=-\frac{f-f^{(0)}}{\tau}. \qquad (23,7)$$

Здесь $\tau$ считается функцией координат, поскольку плотность газа $\rho$ изменяется от точки к точке.

Из предыдущего ясно, что в этом приближении кинетическое уравнение имеет лишь качественный смысл. Тем не менее при малых отклонениях от равновесия кинетическое уравнение часто можно фактически свести к виду (23,7) при известных допущениях о характере функции $\tau$. В особенности это относится к пространственно-однородным газам, находящимся в поле внешних сил.

В виде иллюстрации степени точности релаксационного приближения вычислим в этом приближении вязкость сжимаемого газа. В релаксационном приближении имеем

$$v_k\frac{\partial f}{\partial x_k}=-\frac{f-f^{(0)}}{\tau}. \qquad (23,8)$$

При малых отклонениях от состояния равновесия в левую часть (23,8) следует подставить выражение (22,10), следовательно,

$$-\frac{m}{kT}\left(V_iV_k-\frac{V^2}{3}\delta_{ik}\right)U_{ik}f_0=\frac{f-f_0}{\tau},$$

откуда

$$f=f_0-\frac{m\tau}{kT}\left(V_iV_k-\frac{V^2}{3}\delta_{ik}\right)U_{ik}f_0. \qquad (23,9)$$

Сравнивая это выражение с (22,22), мы видим, что они оказываются тождественными, если положить

$$\tau=\frac{4}{3\sqrt{2}}\frac{1}{Ng}\simeq\frac{l}{\bar{v}_{\text{отн}}}, \qquad (23,10)$$

где $l=\frac{1}{N\sigma_{\text{полн}}}$ — средняя длина свободного пробега.

Таким образом, если считать сечение рассеяния не зависящим от скорости, то релаксационное приближение дает тот же

результат, что и точное решение линеаризованного уравнения Больцмана.

Если сечение зависит от скорости, то различие в выражении для возмущенной функции распределения сведется к числовому коэффициенту. Соответственно будут различными числовые коэффициенты в выражениях для вязкости. Поскольку вид функциональной зависимости сечения от скорости и углов для молекулярных столкновений известен плохо, нет никакой уверенности в значении числовых коэффициентов в формулах для кинетических коэффициентов. Поэтому релаксационное приближение, сильно упрощающее вычисления, дает, в сущности, столь же точное решение задачи.

## § 24. Диффузия легкой примеси в основном газе

Весьма важным случаем, допускающим существенное упрощение кинетического уравнения Больцмана, является диффузия частиц примеси легкого газа к основному тяжелому газу.

Мы будем считать, что концентрация примеси к основному газу мала, т. е. что число частиц примеси в единице объема $n \ll N$, где $N$ — число частиц основного газа. Массу частиц легкого газа $m$ мы будем считать малой по сравнению с массой $M$ частиц основного газа.

Движение примеси может происходить под влиянием разности концентраций (диффузия) или разности температур (термодиффузия).

Мы будем считать, что число частиц основного газа в единице объема постоянно вдоль газа. Число частиц примеси в единице объема изменяется вдоль некоторого направления, которое мы выберем за ось $x$. Состояние системы будем считать стационарным, влияния внешнего поля сил мы рассматривать не будем. Напишем кинетическое уравнение для функции распределения частиц легкого газа [1]).

Функция распределения изменяется только в направлении оси $x$, так что ее можно написать в виде $f(p, \theta, x)$, где $p$ — импульс частицы, а $\theta$ — угол, образуемый вектором импульса с осью $x$. Поскольку число частиц примеси мало́, их столкновения между собой можно не рассматривать. Поэтому в интеграле столкновений следует оставить лишь член, учитывающий столкновения частиц примеси с частицами основного газа. Столкновения легких частиц с тяжелыми можно считать вполне упругими, а скорость их движения — большой по сравнению со скоростью движения тяжелых молекул основного газа. Последние

---

[1]) В этом параграфе мы будем следовать книге Л. Д. Ландау и Е. М. Лифшица, Механика сплошных сред, Гостехиздат, 1944.

мы будем считать неподвижными и положим

$$v_{\text{отн}} \approx v,$$

где $v$ — скорость движения частиц примеси. Соответственно, $\sigma(v_{\text{отн}}, \alpha) \approx \sigma(v, \alpha)$.

Интеграл столкновений приобретает следующий вид:

$$I = \int v_{\text{отн}} \sigma(v_{\text{отн}}, \alpha)(Ff' - Ff)\, d\boldsymbol{p}_1\, d\boldsymbol{\Omega} \approx vN \int \sigma(v, \alpha)(f' - f)\, d\boldsymbol{\Omega}. \quad (24,1)$$

Здесь $F$ означает функцию распределения молекул основного газа, которая равнозначна функциям $f_3$ и $f_1$ в обозначениях предыдущего параграфа. Через $f'$ обозначена функция $f_2$; $N = \int F\, d\boldsymbol{p}_1$ — полное число молекул основного газа в единице объема.

Поскольку частицы примеси испытывают лишь вполне упругие столкновения, их импульсы $\boldsymbol{p}'$ и $\boldsymbol{p}$ соответственно до и после столкновения имеют одно и то же абсолютное значение; процесс столкновения сопровождается лишь изменением направления полета, так что

$$f'(\boldsymbol{p}', x) \equiv f_2(p, \theta', x) = f(\theta', x),$$
$$f(\boldsymbol{p}, x) \equiv f(p, \theta, x) = f(\theta, x).$$

Аргумент $p$ мы для краткости писать не будем. Физически это означает, что мы будем искать зависимость распределения частиц примеси от координаты $x$ и направления полета по отношению к оси $x$ при данном значении абсолютной величины импульса. В результате $I$ можно написать в виде

$$I = vN \int \sigma\left(\frac{p}{m}, \alpha\right)[f(\theta', x) - f(\theta, x)]\, d\Omega.$$

Кинетическое уравнение (14,10) запишется соответственно как

$$\frac{p}{m} \cos\theta \frac{\partial f(\theta, x)}{\partial x} = vN \int \sigma\left(\frac{p}{m}, \alpha\right)[f(\theta', x) - f(\theta, x)]\, d\Omega. \quad (24,2)$$

В отличие от уравнения (14,10), найденное кинетическое уравнение (24,2) для функции распределения частиц примеси является линейным интегро-дифференциальным уравнением. Его приближенное решение можно найти в виде разложения по степеням малого параметра, в данном случае отношения $\frac{v_x}{v}$. Этот метод решения кинетического уравнения получил название метода Лоренца. Если разность концентрации или разность температур, вызывающая систематическое движение примеси вдоль оси $x$, достаточно мала (см. ниже), то направленное движение будет накладываться на беспорядочное движение. В среднем

можно считать, что скорость упорядоченного движения $v_x$ мала по сравнению со скоростью хаотического движения $v$. Отклонение системы от равновесного состояния, в котором имеется полная изотропия скоростей, будет мало́. Поэтому будем искать решение кинетического уравнения (24,2) в виде

$$f(\theta,\ x) \approx f_0(x) + v_x f_1(x) + \ \dots \ \approx f_0 + v\cos\theta\, f_1. \qquad (24{,}3)$$

Здесь $f_0(x)$ — равновесная функция распределения в точке $x$ (аргумент $p$ не записан для краткости), т. е.

$$f_0(p,\ x) \equiv f_0 = n(x)\,\frac{m^{3/2}}{(2\pi k T_a)^{3/2}}\, e^{-\frac{p^2}{2mkT}};$$

здесь $n(x)$ — число частиц примеси в единице объема, отнесенное к точке $x$, $f_1(x)\, v\cos\theta$ — искомая малая поправка к статистическому распределению.

Величина $v_x$ или $\cos\theta$, характеризующая степень анизотропии функции распределения, пропорциональна величине разности концентраций или температур, вызывающей эту анизотропию. Поэтому разложение (24,3) представляет, по существу, разложение в ряд по степеням малой анизотропии функции распределения.

Подставляя разложение (24,3) в (24,2), заметим прежде всего, что равновесная функция распределения обращает интеграл столкновений в нуль. Таким образом, в правой части (24,2) будет стоять величина

$$I = v^2 N \int \sigma(v,\ \alpha) f_1(x)[\cos\theta' - \cos\theta]\, d\Omega =$$
$$= v^2 N f_1(x) \int \sigma(v,\ \alpha)[\cos\theta' - \cos\theta] \sin\alpha\, d\alpha\, d\beta\,.$$

В левой части имеем

$$\frac{p_x}{m}\frac{\partial f_0}{\partial x} + \left(\frac{p_x}{m}\right)^2 \frac{\partial f_1}{\partial x} \approx v\cos\theta\,\frac{\partial f_0}{\partial x}\,.$$

Член, содержащий производную $\frac{\partial f}{\partial x}$, опущен, как малый по сравнению с оставленным. Таким образом, получаем

$$\cos\theta\,\frac{\partial f_0}{\partial x} = vN f_1(x) \int \sigma(v,\ \alpha)[\cos\theta' - \cos\theta]\, d\Omega\,. \qquad (24{,}4)$$

Для дальнейшего необходимо связать углы $\theta'$ и $\theta$, образуемые с осью $x$ импульсами частиц с углом рассеяния $\alpha$. Воспользуемся для этого известной формулой сферической тригонометрии (1,7), т. I, написав

$$\cos\theta' = \cos\theta\cos\alpha + \sin\theta\sin\alpha\cos\beta,$$

где $\beta = \psi_1 - \psi_2$, $\psi_1$ и $\psi_2$ — азимутальные углы векторов импульса $\boldsymbol{p}$ и $\boldsymbol{p}'$.

Тогда можем написать:

$$\int \sigma(v,\ \alpha)[\cos\theta' - \cos\theta]\sin\alpha\, d\alpha\, d\beta =$$

$$= \int \sigma(v,\ \alpha)\cos\theta(\cos\alpha - 1)\sin\alpha\, d\alpha\, d\beta +$$

$$+ \int \sigma(v,\ \alpha)\sin\theta\sin\alpha\cos\beta\sin\alpha\, d\alpha\, d\beta =$$

$$= -2\pi\cos\theta \int \sigma(v,\ \alpha)(1 - \cos\alpha)\sin\alpha\, d\alpha.$$

В последнем преобразовании учтено, что $\int \cos\beta\, d\beta = 0$. При этом (24,4) приобретает вид

$$\cos\theta\frac{\partial f_0}{\partial x} = -\cos\theta\cdot 2\pi N\left[\int_0^\pi \sigma(v,\ \alpha)(1 - \cos\alpha)\sin\alpha\, d\alpha\right] f_1 v.$$

Отсюда следует, что искомая функция $f_1$ равна

$$f_1 = -\frac{1}{vN\sigma_{tr}}\frac{\partial f_0}{\partial x}, \tag{24,5}$$

где обозначено:

$$\sigma_{tr} = 2\pi\int_0^\pi \sigma(v,\ \alpha)(1 - \cos\alpha)\sin\alpha\, d\alpha.$$

Величина $\sigma_{tr}$ носит название транспортного сечения столкновения. В частном случае сечения не зависящего от угла рассеяния $\sigma(v, \alpha) = \sigma(v)$, имеем

$$\sigma_{tr} = \sigma(v)\, 2\pi\int_0^\pi (1 - \cos\alpha)\sin\alpha\, d\alpha = 4\pi\sigma(v).$$

Если считать сталкивающиеся частицы твердыми шариками с радиусами $r_1$ и $r_2$, то $\sigma_{tr} = \pi(r_1 + r_2)^2$.

Величина

$$\lambda_{tr} = \frac{1}{N\sigma_{tr}} \tag{24,6}$$

носит название транспортной длины свободного пробега при движении частицы легкого газа в тяжелом. Ее наглядный смысл будет пояснен ниже. Вводя в (24,5) определение длины свободного пробега, находим

$$f_1(x) = -\lambda_{tr}\frac{\partial f_0(x)}{\partial x}\frac{1}{v} \tag{24,7}$$

и

$$f(p,\ x,\ \theta) = f_0(p,\ x) - \lambda_{tr}\cos\theta\frac{\partial f_0(p,\ x)}{\partial x}. \tag{24,8}$$

Зная функцию распределения, можно найти средний поток частиц примеси в выделенном направлении (т. е. вдоль оси $x$). По определению, средний поток частиц в направлении оси $x$ — $j_x$ равен

$$j_x = \int v_x f \, dp.$$

Действительно, $(v_x f)$ дает число легких частиц с данным импульсом, проходящим через сечение 1 *см*² за 1 секунду в направлении оси $x$. Интегрируя по всем значениям импульса, находим полное число частиц, проходящих через площадку 1 *см*² за 1 секунду в указанном направлений.

Подставляя значение $f$ из (24,8), находим

$$j_x = \int v \cos\theta \, f_0(p, x) \, dp - \int v\lambda_{tr} \cos^2\theta \, \frac{\partial f_0}{\partial x} \, dp. \tag{24,9}$$

Ввиду изотропии функции распределения $f_0(p, x)$ первый интеграл обращается в нуль, так что

$$j_x = -\int v\lambda_{tr} \cos^2\theta \, \frac{\partial f_0}{\partial x} p^2 \, dp \sin\theta \, d\theta \, d\psi. \tag{24,10}$$

Рассмотрим сначала случай, когда температура газа постоянна, а вдоль оси $x$ имеется градиент концентрации примеси $\frac{\partial c}{\partial x}$, где $c = \frac{n}{N+n} \approx \frac{n}{N}$. При этом можно непосредственно выполнить интегрирование, написав

$$j_x = -\int_0^{\pi}\int_0^{2\pi} \cos^2\theta \sin\theta \, d\theta \, d\psi \frac{\partial}{\partial x} \int_0^{\infty} v\lambda_{tr} f_0 p^2 \, dp =$$

$$= -\frac{4\pi}{3} \frac{\partial}{\partial x} \int \frac{v}{N\sigma_{tr}} f_0 p^2 \, dp = -\frac{1}{3}\overline{\left(\frac{v}{\sigma_{tr}}\right)} \frac{\partial c}{\partial x} = -\frac{1}{3}\overline{\left(\frac{v}{N\sigma_{tr}}\right)} N \frac{\partial c}{\partial x}. \tag{24,11}$$

Здесь черта означает среднее значение по равновесному распределению, т. е.

$$\overline{\left(\frac{v}{\sigma_{tr}}\right)} = \frac{1}{n} \int \left(\frac{v}{\sigma_{tr}}\right) f_0 \, dp = \left(\frac{m}{2\pi kT}\right)^{3/2} \int \frac{v}{\sigma_{tr}} e^{-\frac{p^2}{2mkt}} p^2 \, dp.$$

Величина

$$D = \frac{1}{3}\overline{\left(\frac{v}{N\sigma_{tr}}\right)} = \frac{1}{3}\overline{(\lambda_{tr} v)} \tag{24,12}$$

является коэффициентом диффузии. Окончательно для потока частиц легкого газа сквозь тяжелый получаем

$$j_x = -DN \frac{dc}{dx}. \tag{24,13}$$

Если вместо концентрации $c$ пользоваться числом частиц $n$ легкого газа в единице объема, то

$$j_x = -D\frac{\partial n}{\partial x}. \qquad (24,14)$$

Из определения коэффициента диффузии $D$ ясно, что он является величиной существенно положительной. Поэтому поток примеси (легкого газа) всегда направлен в сторону убывания его концентрации.

Если каким-либо способом вдоль оси $x$ все время поддерживается постоянная разность концентраций, в смеси газов будет существовать стационарное движение легкой компоненты (примеси) в направлении от большей концентрации к меньшей. Если же, наоборот, перепад концентрации не поддерживать искусственно, то произойдет выравнивание концентраций и состав смеси станет постоянным по всему сосуду.

Мы ограничились случаем диффузии примеси легких частиц в тяжелом газе. Аналогичным образом можно вычислить выражения для диффузии тяжелой примеси в легком газе. Мы на этом останавливаться здесь не будем.

Рассмотрим теперь подробнее смысл длины свободного пробега $\lambda_{tr}$.

Если легкая частица движется со средней скоростью $\bar{v}$, она сталкивается со всеми (неподвижными) частицами, лежащими в вырезаемом ею цилиндре высотой $\bar{v}$ и площадью $\sigma_{tr}$. Появление $\sigma_{tr}$ вместо $\sigma$ означает учет того обстоятельства, что не все соударения являются равно эффективными. Так, например, столкновения с углом рассеяния $\alpha \approx 0$ в меньшей степени изменяют направление полета и выводят частицу из этого цилиндра, чем столкновения с $\alpha = \pi$. Полное число столкновений равно соответственно $N\bar{v}\sigma_{tr}$. Путь, проходимый в среднем между двумя последовательными столкновениями, т. е. средняя длина свободного пробега, равен

$$\lambda_{tr} = \frac{\bar{v}}{N\bar{v}\sigma_{tr}} = \frac{1}{N\sigma_{tr}}. \qquad (24,15)$$

Полезно отметить зависимость $\lambda_{tr}$ от давления в газе. Поскольку $p = NkT$, имеем

$$\lambda_{tr} = \frac{kT}{p\sigma_{tr}}. \qquad (24,16)$$

Если, в частности, считать сталкивающиеся частицы твердыми сферами и $\sigma_{tr}$ выражается формулой $\sigma_{tr} = \pi(r_1 + r_2)^2$, где $r_1$ и $r_2$ — радиусы частиц, то

$$\lambda_{tr} = \frac{kT}{p}\frac{1}{\pi(r_1 + r_2)^2}.$$

Соответственно, коэффициент диффузии

$$D = \frac{1}{3}\lambda_{tr}\bar{v} = \frac{1}{3\pi(r_1+r_2)^2 p}\sqrt{\frac{8(kT)^3}{\pi m}}. \qquad (24,17)$$

Таким образом, коэффициент диффузии зависит от свойств диффундирующей частицы (ее массы и размера), а также радиуса молекул основного газа; он растет с температурой $\sim T^{3/2}$ и обратно пропорционален давлению.

Найдем теперь условия применимости найденного приближенного решения. Решение применимо, если разложение (24,3) достаточно быстро сходится. Для этого в свою очередь необходимо выполнение условия

$$|vf_1| \ll f_0,$$

или, если подставить значение $f_1$ из (24,5),

$$\lambda_{tr}\frac{1}{f_0}\frac{\partial f_0}{\partial x} \ll 1.$$

Последнее неравенство означает, что равновесная функция должна достаточно мало изменяться на расстоянии, равном длине свободного пробега.

## § 25. Термодиффузия в газах

Выше, рассматривая движение примеси легких частиц, мы считали температуру газа постоянной. Теперь мы откажемся от этого допущения и рассмотрим более общий случай, когда в направлении оси $x$ одновременно происходит изменение концентрации диффундирующего газа и его температуры.

Найдем снова поток примеси легкого газа вдоль оси $x$, воспользовавшись формулой (24,10). В ней теперь мы не можем, однако, выносить величины, зависящие от температуры газа, за знак пространственного дифференцирования, так как сама температура изменяется от точки к точке. Перепишем поэтому формулу (24,10) в виде

$$j_x = -\int \frac{\cos^2\theta}{N}\frac{d}{dx}\left(\frac{v}{\sigma_{tr}} f_0\right) dp. \qquad (25,1)$$

Мы внесли под знак пространственного дифференцирования величины $\sigma_{tr}$ и $v$, которые являются функциями истинной скорости частиц (но не средней скорости частиц, зависящей от температуры).

Выполняя интегрирование по углам, аналогично формуле (24,11), находим:

$$j_x = -\frac{4\pi}{3}\frac{1}{N}\frac{d}{dx}\int \frac{v}{\sigma_{tr}} f_0 p^2\, dp = -\frac{1}{3N}\frac{d}{dx} n\left(\overline{\frac{v}{\sigma_{tr}}}\right). \qquad (25,2)$$

Чтобы перейти к обычным обозначениям, в которых $j_x$ выражается в зависимости от концентрации легкой примеси, напишем

$$N = \frac{p}{kT},$$

где давление газа $p$ постоянно вдоль смеси. Тогда имеем

$$j_x = -\frac{kT}{3}\frac{d}{dx}\frac{n}{p}\overline{\left(\frac{v}{\sigma_{tr}}\right)} =$$
$$= -\frac{kT}{3}\frac{d}{dx}\frac{n}{NkT}\overline{\left(\frac{v}{\sigma_{tr}}\right)} = -\frac{T}{3}\frac{d}{dx}\frac{c}{T}\overline{\left(\frac{v}{\sigma_{tr}}\right)} =$$
$$= -\frac{1}{3}\overline{\left(\frac{v}{\sigma_{tr}}\right)}\frac{dc}{dx} - \frac{Tc}{3}\frac{d}{dT}\left[\frac{1}{T}\overline{\left(\frac{v}{\sigma_{tr}}\right)}\right]\frac{dT}{dx}. \quad (25,3)$$

Вводя коэффициент диффузии, находим

$$j_x = -DN\frac{dc}{dx} - Tc\frac{d}{dT}\left[\frac{N}{T}D\right]\frac{dT}{dx}. \quad (25,4)$$

Формулу для потока частиц принято записывать в виде

$$j_x = -DN\left(\frac{dc}{dx} + k_T\frac{dT}{dx}\right). \quad (25,5)$$

Сравнение формул (25,4) и (25,5) дает

$$k_T = c\frac{d}{dT}\ln\left[\frac{1}{T}\left(\frac{\bar{v}}{\sigma_{tr}}\right)\right]. \quad (25,6)$$

Величина $k_T$ носит название коэффициента термодиффузии.

Для выяснения смысла полученного результата положим $\frac{dc}{dx} = 0$, т. е. рассмотрим случай постоянства концентрации примеси в сосуде с газом. При этом

$$j_x = -DNk_T\frac{dT}{dx}. \quad (25,7)$$

Мы видим, что при наличии перепада температуры в смеси газов постоянного состава возникает движение частиц примеси по отношению к основному газу. Это явление носит название термической диффузии, или термодиффузии. Величина термодиффузионного потока определяется величиной градиента температуры и значением величины $k_T$.

Наличие термодиффузионного потока, т. е. относительного движения частиц примеси в определенном направлении, вызовет изменение состава смеси, т. е. появление некоторого градиента концентрации $\frac{dc}{dx} \neq 0$. Последний эффект в свою очередь приведет к появлению потока частиц примеси, который будет снижать накапливание примеси из-за термодиффузии. В итоге может установиться такое состояние, при котором по-

ток частиц, вызываемый термодиффузией, в точности компенсируется потоком из-за обычной диффузии. При этом полный поток примеси относительно основного газа будет равен нулю, и формула (25,5) дает

$$j_x = -DN\left(\frac{dc}{dx} + k_T\frac{dT}{dx}\right) = 0,$$

так что

$$\frac{dc}{dx} = -k_T\frac{dT}{dx}. \tag{25,8}$$

В неизотермической смеси газов устанавливается стационарный градиент концентрации, определяемый формулой (25,8). В общем случае, независимо от того, достигнуто такое установившееся состояние или нет, температурный градиент вызывает появление в смеси газов градиента концентрации.

Мы до сих пор нигде не указывали, в каком направлении будет двигаться легкая примесь — в сторону роста или уменьшения температуры. Из (25,7) ясно, что направление потока определяется знаком коэффициента термодиффузии $k_T$, поскольку $D$ — величина существенно положительная. Знак $k_T$ зависит от знака производной $\frac{d}{dT}\left[\overline{\left(\frac{v}{\sigma_{tr}}\right)}\frac{1}{T}\right]$. В общем виде указать знак этой производной невозможно. Он зависит от конкретного закона взаимодействия между молекулами примеси и основного газа.

Явление термодиффузии имеет важное практическое значение. Оно используется для разделения газовых смесей, в частности, смесей изотопов. Пусть в некотором сосуде, содержащем смесь газов, одна стенка поддерживается при температуре $T_1$, вторая при температуре $T_2 > T_1$. При этом в сосуде возникает термодиффузионный поток. Обычно легкий газ движется против потока тепла, т. е. по направлению к горячей стенке. Если первоначально в сосуде находилась смесь постоянного состава, то в результате термодиффузии у более нагретой стенки она обогатится одной, например, легкой компонентой. Производя здесь отбор частиц легкой компоненты, можно поддерживать стационарный поток термодиффузии и производить разделение легкой и тяжелой компонент смеси.

## § 26. Дисперсия звука в газах

Одним из сравнительно новых приложений кинетической теории газов является получение закона дисперсии звука в газах. Рассмотрим равновесный одноатомный газ, в котором распространяется плоская звуковая волна. Выберем направление ее распространения за ось $x$-в. Естественно пытаться искать возмущения всех величин, характеризующих состояние газа, в

частности, функции распределения в виде

$$\varphi = F(v)\, e^{i(\omega t - \varkappa x)}. \qquad (26,1)$$

Уравнение для возмущенной функции распределения имеет вид (21,32).

Подстановка (26,1) в (21,32) дает

$$i\omega F(v) - iv\varkappa F(v) = I(\varphi_0). \qquad (26,2)$$

Разложим $F(v)$ в ряд по собственным решениям уравнения (21,33)

$$F(v) = \sum \alpha_i \varphi_i^{(0)}.$$

Тогда будем иметь

$$\sum \left[ i\omega\alpha_i\varphi_i^{(0)} - i\varkappa v\alpha_i\varphi_i^{(0)} \right] = \lambda_k\alpha_k\varphi_k^{(0)}. \qquad (26,3)$$

Умножая (26,3) на $\varphi_k^{(0)}$ и интегрируя, приходим к системе линейных алгебраических уравнений

$$i\omega\alpha_k + ik\sum \beta_{ik}\alpha_i - \lambda_k\alpha_k = 0, \qquad (26,4)$$

где

$$\beta_{ik} = \frac{\int \varphi_i^{(0)} v \varphi_k^{(0)}\, dv}{\int \varphi_i^{(0)}\varphi_k^{(0)}\, dv}.$$

Для того чтобы система (26,4) имела ненулевые решения, необходимо, чтобы ее детерминант обращался в нуль. Это дает

$$\| (i\omega + \lambda_k)\,\delta_{ik} - ik\beta_{ik} \| = 0. \qquad (26,5)$$

Детерминант (26,5) имеет, вообще говоря, бесконечно высокий порядок.

Для определения закона дисперсии $\omega(k)$ следует раскрыть этот определитель и найти его корни.

Если ограничиться первыми известными собственными функциями однородного уравнения (21,32), то мы имеем

$$\varphi_1 = 1, \quad \varphi_2 = v, \quad \varphi_3 = \frac{mv^2}{2},$$

$$\lambda_1 = 0, \quad \lambda_2 = 0, \quad \lambda_3 = 0.$$

При этом в детерминанте следует удержать три первых столбца и три строки [1]).

Простое вычисление приводит к формуле, получающейся в гидродинамическом приближении,

$$\omega = \sqrt{\frac{5}{3}\frac{kT}{m}}\,\varkappa.$$

---

[1]) См. Д. Уленбек, Д. Форд, Лекции по статистической механике, «Мир», 1965.

Скорость звука $c$ оказывается постоянной:

$$c = \frac{\omega}{\varkappa} = \sqrt{\frac{5}{3}\frac{kT}{m}}.$$

Учитывая собственные функции и собственные значения более высокого порядка, можно найти закон дисперсии при возрастании частоты.

Оказалось при этом, что скорость звука растет с частотой и одновременно возникает поглощение звука. Коэффициент поглощения быстро растет с уменьшением длины волны. При приближении длины волны звука $1/\varkappa$ к длине свободного пробега коэффициент поглощения возрастает до значения $1/\varkappa$. Это означает, что распространение звука как периодического возмущения прекращается при $\varkappa \sim \frac{1}{\lambda}$.

## § 27. Линеаризованное уравнение Больцмана для квазигазовых систем

Применение уравнения Больцмана не ограничивается случаем идеальных газов. Наоборот, наиболее важные его применения вообще не связаны с рассмотрением идеальных газов. Существует большое число важных случаев, когда кинетическое поведение систем сходно с газовым.

В самом общем виде свойства таких систем, которые мы будем именовать квазигазовыми, могут быть сформулированы следующим образом: пусть имеется некоторая система не взаимодействующих между собой легких частиц (частиц первого сорта), помещенная в среду, образованную другими взаимодействующими между собой тяжелыми частицами (частицами второго сорта). Между частицами обоих сортов имеет место некоторое взаимодействие, имеющее характер парных столкновений. Система частиц первого сорта может быть описана некоторой одночастичной функцией распределения $f(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{v}, t)$, поскольку между этими частицами нет никакого взаимодействия. Тогда в общем случае можно написать для изменения функции распределения

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\boldsymbol{p}}{m}\frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{r}} + \boldsymbol{F}\nabla_p f = \left(\frac{df}{dt}\right)_{\text{ст}}, \tag{27,1}$$

где $\left(\frac{df}{dt}\right)_{\text{ст}}$ описывает изменение функции распределения вследствие парного взаимодействия — столкновений между частицами первого и второго сорта.

Предположим, далее, что соударения можно считать совершенно упругими, а состояние частиц второго сорта

неизменяющимся при соударениях. Тогда можно написать

$$\left(\frac{df}{dt}\right)_{\text{ст}} = IN = N\int \sigma(v,\ \alpha)\, v\,[f_1 - f]\, d\Omega. \qquad (27,2)$$

Здесь, в отличие от (14,10), $v$ представляет скорость легкой частицы, $N$ — число тяжелых частиц в единице объема. В результате для функции распределения легких частиц получается уравнение

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\boldsymbol{p}}{m}\frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{r}} + \boldsymbol{F}\frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{p}} = N\int \sigma v\,[f_1 - f]\, d\boldsymbol{\Omega}, \qquad (27,3)$$

которое представляет линейное интегро-дифференциальное уравнение Больцмана. Частным случаем его являлось уравнение (24,2), описывающее диффузию легкой примеси.

В главах, посвященных теории плазмы и теории твердого тела, мы подробно изложим современные представления о поведении электронов в плазме и в твердых телах. Имея в виду дальнейшие приложения, положим, что внешние силы, действующие на частицы первого сорта, являются силами Лоренца:

$$\boldsymbol{F} = e\left(\boldsymbol{E} + \frac{1}{c}[\boldsymbol{vH}]\right).$$

Будем считать систему неравновесной, но стационарной, температуру и химический потенциал изменяющимися в пространстве, так что $T = T(\boldsymbol{r})$; $\mu = \mu(\boldsymbol{r})$.

Тогда уравнение (27,3) приобретает вид

$$\frac{\boldsymbol{p}}{m}\frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{r}} + e\left(\boldsymbol{E} + \frac{1}{c}[\boldsymbol{vH}]\right)\frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{p}} = N\int \frac{p}{m}\sigma(f_1 - f)\, d\boldsymbol{\Omega}. \qquad (27,4)$$

Для нахождения решения стационарного линейного уравнения Больцмана будем считать заданным локально равновесное распределение $f^{(0)}(\varepsilon, T, \mu)$, где $\varepsilon$ — энергия частицы, $\mu$ и $T$ локальные значения температуры и парциального потенциала. Локально равновесное распределение $f^{(0)}$ может быть как распределением Максвелла, так и распределением Ферми или Бозе. Считая отклонение от состояния равновесия достаточно малым, можно пытаться искать решение (27,4) в виде

$$f \cong f^{(0)} + f'(\boldsymbol{p},\ \boldsymbol{r}),$$

где $|f'| \ll f^{(0)}$. Физически это означает, что все поля, действующие на частицы, а также все градиенты температуры и концентраций малы. В отличие от $f^{(0)}$, добавка к функции распределения $f'$ не обладает сферической симметрией в пространстве импульсов.

Сохранение полного числа частиц требует выполнения условия

$$\int f'(\boldsymbol{p},\ \boldsymbol{r})\, d\boldsymbol{p} = 0. \tag{27,5}$$

В общем случае можно написать

$$f^{(0)} = f^{(0)}\left(\frac{\varepsilon - \mu}{kT}\right). \tag{27,6}$$

Подставляя (27,5) в (27,4), будем удерживать в нем лишь величины старшего порядка малости.. Имеем, очевидно,

$$\frac{\boldsymbol{p}}{m}\frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{r}} \simeq \frac{\boldsymbol{p}}{m}\frac{\partial f^{(0)}}{\partial \boldsymbol{r}}.$$

Преобразуем значение производной:

$$\frac{\partial f^{(0)}}{\partial \boldsymbol{r}} = \frac{\partial f^{(0)}\left(\frac{\varepsilon-\mu}{kt}\right)}{\partial \boldsymbol{r}} = \frac{\partial f^{(0)}}{\partial \varepsilon}(\varepsilon - \mu)\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{r}}\left(\frac{1}{kT}\right) - \frac{\partial f^{(0)}}{\partial \varepsilon}\frac{1}{kT}\frac{\partial \mu}{\partial \boldsymbol{r}},$$

так что

$$\frac{\boldsymbol{p}}{m}\frac{\partial f^{(0)}}{\partial \boldsymbol{r}} = \frac{\boldsymbol{p}}{m}\frac{\partial f^{(0)}}{\partial \varepsilon}\left[(\varepsilon - \mu)\nabla\frac{1}{kT} - \frac{\nabla\mu}{kT}\right]. \tag{27,7}$$

Далее, имеем

$$e\boldsymbol{E}\frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{p}} \simeq e\boldsymbol{E}\frac{\partial f^{(0)}}{\partial \varepsilon}\frac{\partial \varepsilon}{\partial \boldsymbol{p}} = \frac{e\boldsymbol{p}\boldsymbol{E}}{m}\left(\frac{\partial f^{(0)}}{\partial \varepsilon}\right), \tag{27,8}$$

$$\frac{e}{mc}[\boldsymbol{p}\boldsymbol{H}]\frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{p}} = \frac{e}{mc}\frac{\partial f^{(0)}}{\partial \varepsilon}\frac{\boldsymbol{p}}{m}[\boldsymbol{p}\boldsymbol{H}] + \frac{e}{mc}\frac{\partial f'}{\partial \boldsymbol{p}}[\boldsymbol{p}\boldsymbol{H}] = \frac{e[\boldsymbol{p}\boldsymbol{H}]}{mc}\frac{\partial f'}{\partial \boldsymbol{p}}, \tag{27,9}$$

поскольку первое слагаемое тождественно обращается в нуль.

Наконец, для интеграла столкновений находим

$$I = N\int \frac{p}{m}\sigma[f_1' - f']\, d\boldsymbol{\Omega},$$

поскольку равновесное распределение обращает $I$ в нуль. Подставляя (27,7), (27,9) в (27,4) находим окончательно

$$\frac{\boldsymbol{p}}{m}\frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{r}} + \frac{\partial f^{(0)}}{\partial \varepsilon}\frac{\boldsymbol{p}}{m}\left\{(\varepsilon - \mu)\nabla\frac{1}{kT} - \frac{\nabla\mu}{kT} + e\boldsymbol{E}\right\} =$$
$$= -\frac{e}{mc}[\boldsymbol{p}\boldsymbol{H}]\frac{\partial f'}{\partial \boldsymbol{p}} + N\int \sigma\frac{p}{m}[f_1' - f']\, d\boldsymbol{\Omega}. \tag{27,10}$$

Из-за наличия в правой части дополнительного члена решение уравнения (27,9) в магнитом поле имеет некоторые особенности. Мы рассмотрим его в гл. III, а пока положим $\boldsymbol{H} = 0$. Тогда уравнение (27,10) превращается в линейное интегральное

уравнение, которое удобно записать сокращенно в виде

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{p} = N\frac{p}{m}\int \sigma\left(\left|\frac{p}{m}\right|, \ \alpha\right)[f_1' - f']\, d\boldsymbol{\Omega}.$$

Будем пытаться искать его решение, как это было уже сделано в § 24, в виде

$$f' = -\alpha p A \cos\theta,$$

где $\theta = \angle(\boldsymbol{p}, \boldsymbol{A})$ и $\alpha$ — некоторая постоянная. Тогда имеем

$$pA\cos\theta = \alpha\frac{p}{m}NA\int \sigma\left(\left|\frac{p}{m}\right|, \ \alpha\right)[\cos\theta_1 - \cos\theta]\, d\boldsymbol{\Omega},$$

где $\theta_1 = L(\boldsymbol{p}_1, \boldsymbol{A})$. Значение $\cos\theta'$ можно выразить через $\cos\theta$ и $\cos\alpha$ с помощью формулы сферической тригонометрии [т. I, (1.6)]. Пользуясь этим выражением, находим

$$\int \sigma\left(\left|\frac{p}{m}\right|, \ \alpha\right)(\cos\theta\cos\alpha - \cos\theta)\, d\boldsymbol{\Omega} = -\cos\theta\sigma_{tr}.$$

Таким образом, имеем

$$\alpha = \frac{1}{Nv\sigma_{tr}} = \tau.$$

Окончательно для функции распределения получаем

$$f = f_0 - \tau\frac{\boldsymbol{p}}{m}\frac{\partial f^{(0)}}{\partial\varepsilon}\left\{(\varepsilon - \mu)\nabla\frac{1}{kT} - \frac{\nabla\mu}{kT} + e\boldsymbol{E}\right)\right\}. \qquad (27,11)$$

Заметим прежде всего, что интеграл столкновений в том же приближении можно написать в виде

$$NI = N\frac{f - f^{(0)}}{\tau}.$$

Последнее выражение сразу показывает, что $\tau$ представляет не что иное, как время релаксации [сравни с (23,6)].

Нарушение сферической симметрии функции распределения в пространстве импульсов оказывается пропорциональным значению $\cos\theta$. Фактически представление функции распределения в виде (27,11) означает разложение ее в ряд по полиномам Лежандра, в котором удержан первый член разложения. Легко видеть, что дополнительное условие на функцию распределения (27,5) автоматически удовлетворяется.

Нарушение сферической симметрии функции распределения вызывает появление среднего потока частиц, плотность которого равна

$$\boldsymbol{j} = \int \boldsymbol{v}f\, d\boldsymbol{p} = -\int \tau\frac{\partial f^{(0)}}{\partial\varepsilon}\left\{\frac{\boldsymbol{p}}{m}, \ (\varepsilon - \mu)\nabla\frac{1}{kT} - \frac{\Delta\mu}{kT} + e\boldsymbol{E}\right\}\boldsymbol{v}\, d\boldsymbol{p}. \qquad (27,12)$$

Поток $j$ согласно (21,8) представляет первый момент функции распределения.

Полезно заметить, что поток $j$ зависит от свойств системы только через посредство производной по энергии от равновесной функции распределения (27,6). Ясно, что если бы распределение по энергиям было равномерным, поток частиц обратился бы в нуль.

В главе V мы воспользуемся полученными выражениями для $f$ и $j$.

## § 28. Решение уравнения Больцмана для квазигазовых систем во внешнем поле сил

В дальнейшем мы будем пользоваться общим решением линеаризованного уравнения Больцмана во внешнем поле сил.

Рассмотрим уравнение

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \boldsymbol{v}\frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{r}} + \frac{\boldsymbol{F}}{m}\frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{v}} = I. \tag{28,1}$$

Будем считать поле внешних сил слабым и искать решение (28,1) в виде ряда последовательных приближений. Ограничиваясь нулевым и первым членами разложения, можем написать

$$f = f^{(0)}(\boldsymbol{v},\ t) + f'(\boldsymbol{v},\ t), \tag{28,2}$$

где $f^{(0)}$ отвечает отсутствию поля, а $f'$ — пропорционально полю.

Чтобы не выписывать громоздких формул, ограничимся сначала пространственно-однородной системой, т. е. положим $\frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{r}} = 0$. Тогда имеем

$$\frac{\partial f'}{\partial t} - I(f') = -\frac{\boldsymbol{F}}{m}\frac{\partial f^{(0)}}{\partial \boldsymbol{v}}, \tag{28,3}$$

где $I(f')$ — значение оператора столкновений, в котором в качестве функции распределения взята функция $f'$.

Наряду с уравнением (28,3) введем уравнение Грина

$$\frac{\partial W}{\partial t} - I(W) = \delta(\boldsymbol{v} - \boldsymbol{v}')\,\delta(t - t'), \tag{28,4}$$

где $W$ — функция Грина, удовлетворяющая условиям

$$\left.\begin{array}{l} W = \begin{cases} 0 & t < t', \\ \infty & t = t', \end{cases} \\ \dfrac{\partial W}{\partial t} - I(W) = 0 \quad t > t' \end{array}\right\}. \tag{28,5}$$

Смысл функции Грина весьма прост: она представляет вероятность того, что частица, имевшая в момент времени $t'$ скорость $v'$, в момент $t$ будет иметь скорость $v$.

Решение уравнения (28,3) может быть выражено через функцию Грина обычной формулой:

$$f(\boldsymbol{v},\ t) = -\int d\boldsymbol{v}' \int dt' \,\frac{\boldsymbol{F}}{m}\,\frac{\partial f^{(0)}}{\partial \boldsymbol{v}'}\cdot W(\boldsymbol{v},\ \boldsymbol{v}',\ t-t') =$$

$$= -\int d\boldsymbol{v}' \int\limits_{-\infty}^{0} dt'\, W(\boldsymbol{v},\ \boldsymbol{v}',\ t-t')\,\frac{\boldsymbol{F}}{m}\,\frac{\partial f^{(0)}}{\partial \boldsymbol{v}'}. \qquad (28{,}6)$$

При этом мы воспользуемся первым свойством функции Грина (28,5). Формула (28,6) дает общую связь между изменением функции распределения и вероятностью перехода $W$. Зная $f'(\boldsymbol{v}, t)$, можно найти поток частиц по формуле

$$\boldsymbol{j} = \int \boldsymbol{v} f(\boldsymbol{v})\, d\boldsymbol{v} = \int \boldsymbol{v}\, d\boldsymbol{v} \int d\boldsymbol{v}' \int\limits_{-\infty}^{0} dt'\, \frac{\boldsymbol{F}}{m}\,\frac{\partial f^{(0)}}{\partial \boldsymbol{v}'}\cdot W(\boldsymbol{v},\ \boldsymbol{v}',\ t-t'). \quad (28{,}7)$$

Аналогичные выражения могут быть получены для пространственно-неоднородной, но стационарной системы. При этом вместо (28,3) и (28,4) имеем (для простоты в одномерном случае)

$$v\,\frac{\partial f'}{\partial x} - I(f') = -\frac{F}{m}\,\frac{\partial f^{(0)}}{\partial v}, \qquad (28{,}8)$$

$$\frac{\partial W(x,\ x',\ t-t')}{\partial x} - \frac{I(W)}{v} = \delta(x-x')\,\delta(v-v'), \qquad (28{,}9)$$

где $W$ представляет вероятность того, что частица, находившаяся в точке $x'$ и имевшая скорость $v'$, перейдет в точку $x$ и приобретает скорость $v$ в единицу времени.

Решение (28,8) имеет вид

$$f'(v,\ r) = -\int W\cdot\left(\frac{F}{m}\,\frac{\partial f^{(0)}}{\partial v'}\right) dx\,dv'. \qquad (28{,}10)$$

В частности, если положить

$$I = \frac{W}{\tau},$$

то (28,9) приобретает вид

$$\frac{\partial W}{\partial x} + \frac{W}{\tau v} = \delta(x-x')\,\delta(v-v').$$

Отсюда следует, что

$$W = \begin{cases} e^{\frac{x-x'}{\tau v}}, & x > x', \\ 0, & x < x', \end{cases}$$

и (28,10) можно написать в виде

$$f'(v,\ x) = \int \left(\frac{F}{m}\,\frac{\partial f^{(0)}}{\partial v'}\right) e^{-\frac{x''}{\tau v}}\, dx''. \qquad (28{,}11)$$

Интегрирование ведется по отрезку траектории, проходящему через точку $x$ в направлении поля, для которого $x'' < x$ [мы произвели замену $(x - x') \to x''$].

Смысл экспоненциального множителя становится весьма прост, если написать его в виде $\exp(-x''/\lambda)$, где $\lambda$ — длина свободного пробега.

Таким образом, во внешнем поле сил линеаризованное уравнение Больцмана допускает решение, выражающееся в самом общем виде через вероятность перехода $W$. Этой формой решения мы будем пользоваться в дальнейшем.

## § 29. Кинетическое уравнение для неодноатомных газов

До сих пор мы ограничивались случаем, когда молекулы газа имели только поступательные степени свободы. Это является хорошим приближением для рассмотрения одноатомных газов. Однако в более важном случае многоатомных газов применимость этого приближения заранее не очевидна. Оказывается, что возможно сформулировать в самом общем виде кинетическое уравнение для двухатомных (линейных) молекул или молекул типа волчка[1]).

Такие молекулы имеют две вращательные степени свободы. Вращательные уровни всегда сильно возбуждены (ср. § 44 ч. III), так что их можно рассматривать классически.

Колебательные степени свободы можно считать не возбужденными при не слишком высоких температурах. Таким образом, движение молекулы задается тремя поступательными и двумя вращательными степенями свободы. Вращательное состояние молекулы можно характеризовать двумя обобщенными координатами (например, двумя углами) и двумя отвечающими этим координатам обобщенными импульсами.

Удобнее, однако, характеризовать вращательное движение четырьмя величинами — тремя компонентами момента импульса $M_i$ ($i = 1, 2$) и углом $\psi$, характеризующим ориентацию молекулы в плоскости, перпендикулярной к вектору $M_i$. В этих переменных кинетическое уравнение приобретает вид

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \boldsymbol{v}\frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{r}} + \frac{\boldsymbol{F}}{m}\frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{v}} + \dot{\psi}\frac{\partial f}{\partial \psi} + \dot{\boldsymbol{M}}\frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{M}} = I. \tag{29,1}$$

Интеграл столкновений имеет вид

$$I = \int (f_2 f_3 w' - f f_1 w)\, d\boldsymbol{v}_1\, d\Omega_V\, d\boldsymbol{M}_1\, d\boldsymbol{M}\, d\psi = \\ = \int w (f_2 f_3 - f f_1)\, d\boldsymbol{v}_1\, d\Omega_V\, d\boldsymbol{M}_1\, d\boldsymbol{M}\, d\psi, \tag{29,2}$$

---

[1]) Мы следуем в дальнейшем работам Ю. Кагана и др., ЖЭТФ, **41**, 1536 (1961); **41**, 844 (1961); **51**, 1893 (1966).

где вероятность перехода $w'$ и $w$ представляют вероятности прямых и обратных переходов.

В силу принципа детального равновесия $w' = w$, так что $w$ не изменяется при замене $\boldsymbol{M}$ на $(-\boldsymbol{M})$.

Здесь обозначено

$$d\boldsymbol{M} = M\, dM\, d\Omega.$$

Элементы телесных углов $d\Omega_M$ и $d\Omega_V$ определяют ориентацию векторов $\boldsymbol{M}$ и $\boldsymbol{v}$.

Величина $\dot{\psi}$ представляет скорость вращения молекулы в плоскости, перпендикулярной к вектору $M$. По порядку величины $1/\dot{\psi} \sim 10^{-13}$ *сек*, т. е. порядка длительности времени соударения. Время $1/\dot{\psi}$ весьма мало́ по сравнению с временем между двумя последовательными соударениями $\tau$. По порядку величины имеем

$$\frac{\partial f}{\partial t} \sim \frac{\Delta f}{\tau} \ll \frac{\Delta f}{1/\dot{\psi}}. \tag{29,3}$$

Поэтому можно считать, что член $\dot{\psi}\frac{\partial f}{\partial \psi}$ является самым большим в уравнении (29,1). В первом приближении можно (29,1) представить как

$$\dot{\psi}\frac{\partial f}{\partial \psi} = 0. \tag{29,4}$$

Это означает, что функцию распределения можно считать не зависящей от угла $\psi$, т. е. положить

$$\frac{\partial f}{\partial \psi} = 0. \tag{29,5}$$

Тогда (29,2) приобретает вид

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \boldsymbol{v}\frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{r}} + \frac{\boldsymbol{F}}{m}\frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{v}} + \dot{\boldsymbol{M}}\frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{M}} = I. \tag{29,6}$$

Локально равновесная функция распределения $f(\boldsymbol{V}, \boldsymbol{M})$ имеет вид

$$f^{(0)} = \left(\frac{m}{2\pi kT}\right)^{3/2} \frac{1}{(4\pi JkT)} e^{-\frac{mV^2}{2kT}} e^{-\frac{M^2}{2JkT}}, \tag{29,7}$$

где по-прежнему $\boldsymbol{V} = \boldsymbol{v} - \boldsymbol{u}$ — скорость поступательного движения молекулы относительно газа как целого.

Рассмотрим теплопроводность газа. Вычисление выполняется по той же схеме, что и для одноатомного газа. Полагая $\boldsymbol{u} = 0$, так что

$$f^{(0)} = \left(\frac{m}{2\pi kT}\right)^{3/2} \frac{1}{(4\pi JkT)} e^{-\frac{mv^2}{2kT}} e^{-\frac{M^2}{2JkT}}, \tag{29,8}$$

напишем функцию распределения при наличии градиента температуры в виде

$$f = f^{(0)}\left(1 + \zeta_k \frac{\partial T}{\partial x_k}\right). \qquad (29,9)$$

Проводя выкладки, аналогичные проделанным в § 22, имеем вместо (22,27)

$$v_k \frac{\partial f^{(0)}}{\partial x_k} = v_k \frac{\partial T}{\partial x_k} \frac{1}{T}\left(\frac{7}{2} - \frac{mv^2}{2kT} - \frac{M^2}{2JkT}\right) f^{(0)}.$$

Соответственно вместо (22,30) получим

$$\frac{\boldsymbol{v}}{T}\left(\frac{7}{2} - \frac{mv^2}{2kT} - \frac{M^2}{2JkT}\right) f^{(0)} =$$

$$= \int f_1^{(0)} v_{\text{отн.}} \sigma \left[\zeta_3 + \zeta_2 - \zeta_1 - \zeta\right] d\boldsymbol{v}_1\, d\Omega\, d\boldsymbol{M}_1\, d\boldsymbol{M}. \qquad (29,10)$$

В отличие от уравнения (22,30), содержащего только один вектор $\boldsymbol{v}$, выделяющий определенное направление, для уравнения (29,10) можно построить три вектора, —$\boldsymbol{v}$, $\boldsymbol{M}(\boldsymbol{M}\boldsymbol{v})$ и $[\boldsymbol{M}\boldsymbol{v}]$, выделяющих три[1]) различные направления в пространстве. Поэтому для вектора $\zeta$ в самом общем виде можно написать вместо (22,31)

$$\zeta = \boldsymbol{v} \cdot \alpha + \boldsymbol{M}(\boldsymbol{M}\boldsymbol{v})\beta + [\boldsymbol{M}\boldsymbol{v}]\gamma, \qquad (29,11)$$

где $\alpha$, $\beta$ и $\gamma$ — скалярные функции.

Нетрудно заметить, однако, что последняя должна быть равна нулю:

$$\gamma = 0.$$

Действительно, левая часть уравнения (29,10) инвариантна относительно замены $\boldsymbol{M}$ на $(-\boldsymbol{M})$. С другой стороны, вектор $[\boldsymbol{M}\boldsymbol{v}]$ изменяет знак при этой замене, а интегральный член содержит еще величины $f^{(0)}$ и $d\boldsymbol{M}_1\, d\boldsymbol{M}$, которые инвариантны при этой замене. Поэтому, если бы мы удержали в (29,11) последний член разложения, левая и правая части уравнений преобразовывались при замене $\boldsymbol{M}$ на $(-\boldsymbol{M})$ по разным законам.

Скалярные функции зависят от всех скалярных аргументов, которые можно построить из величин, входящих в (29,10). Таких скалярных величин можно построить три: $v^2$, $M^2$, $(\boldsymbol{M}\boldsymbol{v})^2$. Таким образом, окончательно,

$$\zeta = \boldsymbol{v}\alpha\left(v^2,\ M^2,\ (\boldsymbol{M}\boldsymbol{v})^2\right) + \boldsymbol{M}(\boldsymbol{M}\boldsymbol{v})\beta\left(v^2,\ M^2,\ (\boldsymbol{M}\boldsymbol{v})^2\right). \qquad (29,12)$$

Скалярные функции $\alpha$ и $\beta$ должны удовлетворять интегральному уравнению (29,10) и дополнительным условиям (22,12) —

[1]) Величина $\boldsymbol{M}$ является псевдовектором.

(22,14). Поток тепла определится по формуле

$$q_k = N \int \left(\frac{mv^2}{2} + \frac{M^2}{2J}\right) f^{(0)} \varphi \, d\boldsymbol{v} = -\varkappa \frac{\partial T}{\partial x_k}. \qquad (29,13)$$

Для нахождения конкретного выражения функций $\alpha$ и $\beta$ и соответственно вычисления коэффициента теплопроводности необходимо сделать допущения о функции $\sigma(\alpha, v_{\text{отн}})$.

В приближении, когда соударения можно считать упругими, а молекулы — твердыми сфероцилиндрами (цилиндрами, ограниченными сверху и снизу полусферами), такие выкладки были проделаны в цитированных работах. Они слишком громоздки для того, чтобы их можно было здесь провести. В итоге для теплопроводности получается значение

$$\varkappa = 1{,}6mk\left(\frac{kT}{\pi m}\right)^{1/2} \frac{1}{l^2\left[\left(\frac{a}{l}\right)^2 + \left(\frac{a}{l}\right) + 0{,}12\right]}, \qquad (29,14)$$

где $l$ — высота цилиндра, а $a$ — радиус полусфер. Аналогичным образом вычисляются и другие кинетические коэффициенты. Приведенные рассуждения имеют скорее методический интерес, поскольку они показывают, как следует искать решения интегрального уравнения (29,10) для неодноатомных молекул, обладающих вращательными степенями свободы.

Более интересным качественным эффектом, который проявляется в двухатомных молекулах, является зависимость кинетических коэффициентов от внешних полей.

Теплопроводность и вязкость парамагнитных газов оказываются зависящими от внешнего магнитного поля (эффект Зенфтлебена). Аналогичные явления наблюдаются в газах из полярных молекул, помещенных в статическое электрическое поле. Оба явления имеют одинаковую физическую природу: при наличии моментов (магнитного или дипольного) молекулы ориентируются полем. В кинетическом уравнении следует удерживать слагаемое, отвечающее зависимости функции распределения от момента. В результате этого возникает дополнительный поток тепла или импульса.

Рассмотрим, например, случай теплопроводности парамагнитного газа в магнитном поле. Кинетическое уравнение имеет вид

$$v_k \frac{f^{(0)}}{T}\left(\frac{7}{2} - \frac{mv^2}{2kT} - \frac{M^2}{2JkT}\right)\frac{\partial T}{\partial x_k} + \dot{\boldsymbol{M}} f^{(0)} \frac{\partial \varphi}{\partial \boldsymbol{M}} = I(\varphi). \qquad (29,15)$$

Здесь для $\dot{M}$ можно написать в квазиклассическом приближении

$$\dot{\boldsymbol{M}} = [\boldsymbol{\mu}\boldsymbol{H}] = \frac{\mu_0 g}{\hbar}[\boldsymbol{M}\boldsymbol{H}] = \gamma[\boldsymbol{M}\boldsymbol{H}],$$

где $\mu$ — магнитный момент, $\mu_0$ — магнетон Бора и $g$ — гиромагнитное отношение. Поэтому имеем

$$v_k \frac{f^{(0)}}{T}\left(\frac{7}{2}-\frac{mv^2}{2kT}-\frac{M^2}{2JkT}\right)\frac{\partial T}{\partial x_k}+\gamma\,[\boldsymbol{MH}]\frac{\partial \varphi}{\partial \boldsymbol{M}}=I(\varphi). \quad (29{,}16)$$

Решение интегрального уравнения (29,16) снова можно пытаться искать в виде

$$\varphi=\zeta_k\frac{\partial T}{\partial x_k}.$$

При этом для вектора $\zeta_k$ получаем

$$\frac{v_k}{T}\left(\frac{7}{2}-\frac{mv^2}{2kT}-\frac{M^2}{2JkT}\right)f^{(0)}+\gamma f^{(0)}\,[\boldsymbol{MH}]_l\frac{\partial \zeta_k}{\partial M_l}=I(\zeta_k). \quad (29{,}17)$$

При наличии магнитного поля $\zeta_k$ определяется векторами $\boldsymbol{v}$, $\boldsymbol{M}$ и $\boldsymbol{H}$. Вычисления, аналогичные приведенным выше, но еще более громоздкие, приводят к выражению для $\zeta_k$. Выражение для теплопроводности находится по формуле (29,13). В полном согласии с опытом оказывается, что изменение коэффициента теплопроводности

$$\Delta\varkappa=\varkappa-(\varkappa)_{H=0}=F\left(\frac{H}{p}\right), \quad (29{,}18)$$

где $F$ — известная функция аргумента $\frac{H}{p}$, а $p$ — давление газа. Температурная зависимость этой величины определяется конкретным видом сечения столкновений молекул.

Наконец, оказывается, что теплопроводность в магнитном поле является анизотропной.

Отношение теплопроводностей при $\nabla T \parallel \boldsymbol{H}$ и $\nabla T \perp \boldsymbol{H}$ в сильных магнитных полях

$$\frac{\Delta\varkappa_{\parallel}}{\Delta\varkappa_{\perp}}\to\frac{3}{2} \quad \text{при} \quad \boldsymbol{H}\to\infty$$

и перестает зависеть от каких-либо параметров.

В случае газов с нелинейными молекулами, обладающими помимо вращательных также колебательными степенями свободы, формулировка кинетического уравнения оказывается затруднительной. Это обстоятельство связано с возможностью переходов между различными колебательными и вращательными состояниями, которые возникают при столкновениях. Если не сделать некоторых допущений о характере перехода энергии от поступательных к колебательным степеням свободы, а также о характере (в частности, о кратности вырождения) последних, уравнение Больцмана вообще не может быть сформулировано и решено.

В случае невырожденных состояний для внутренних степеней свободы удается написать уравнение Больцмана. Однако фактически его решение удается найти только в предельных случаях, когда указанный переход энергии идет без затруднений, или, наоборот, весьма затруднен.

Затрудненный переход энергии между поступательными и внутренними степенями свободы приводит к появлению специфического релаксационного процесса. Это, в свою очередь, оказывает существенное влияние на кинетические свойства газов, в частности, на значение коэффициентов переноса.

По самому смыслу уравнение Больцмана относится к разреженным системам с парными взаимодействиями между частицами.

Поэтому кинетическое уравнение Больцмана позволяет рассмотреть поведение лишь сравнительно весьма ограниченного круга систем.

Тем не менее кинетическое уравнение Больцмана имеет огромное значение для современной физической кинетики. Оно позволяет сделать ряд общих, принципиальных выводов о характере необратимых процессов, сформулировать общие уравнения переноса, ввести важнейшие характеристики поведения системы при необратимом процессе — кинетические коэффициенты.

Для систем, к которым кинетическое уравнение Больцмана применимо, можно получить уравнения переноса, выражение для времен релаксации и коэффициентов переноса, а при известных модельных допущениях — их числовые значения.

Не менее важным является то обстоятельство, что в ряде физических систем и прежде всего в плазме и твердых телах поведение системы удается описать в виде движения системы квазичастиц, свойства которых близки к идеальному газу. По этой причине квантовое обобщение кинетического уравнения Больцмана играет основную роль в теории твердого тела.

Некоторые другие примеры применения уравнения Больцмана к решению кинетических задач будут приведены в последующих параграфах.

## § 30. Замедление быстрых нейтронов

Одним из детально развитых разделов кинетики является теория движения потоков нейтральных частиц или излучения в веществе.

Пусть в некоторой области, которую мы будем называть источником, возникают частицы, которые движутся затем в веществе, испытывая при этом рассеяние или поглощение.

В кинетической теории газов такая постановка вопроса кажется несколько искусственной. Однако с ней приходится сталкиваться очень часто. В виде примера укажем прежде всего задачу о пространственном распределении излучения. Если некоторые источники излучения распределенные излучают спектр частот $S(\omega, \boldsymbol{r})$, то при прохождении через вещество этот спектр будет изменяться. Поглощение и рассеяние будут изменять как интенсивность, так и угловое и частотное распределение излучения.

Другим, весьма подробно изученным случаем взаимодействия нейтральных частиц с веществом является прохождение нейтронов через вещество. Как известно, нейтроны получаются при ядерных реакциях, в частности, при ядерном делении в виде быстрых частиц, с энергиями порядка нескольких миллионов электрон-вольт. Двигаясь в веществе и испытывая столкновения с ядрами, нейтроны замедляются. При неупругих соударениях их энергия уменьшается очень существенно в каждом акте рассеяния. Если, однако, энергия нейтронов оказывается ниже первого возбужденного уровня ядра, то в дальнейшем неупругие столкновения не происходят. Замедление нейтронов оказывается связанным с упругими столкновениями нейтронов с ядрами.

Хотя оба рассматриваемых процесса движения излучения и нейтронов в веществе имеют совершенно различную физическую природу, их формальное рассмотрение оказывается весьма близким. Именно, оказывается, что распределение нейтронов и фотонов в конфигурационном пространстве и по импульсам описываются идентичными уравнениями. Последнее обстоятельство связано с тем, что в обоих процессах можно пренебречь взаимодействием частиц между собой, а взаимодействие с ядрами (для нейтронов) или атомами (для фотонов) имеет характер близкодействия.

Мы в дальнейшем для конкретности будем говорить о движении потока нейтронов в веществе.

Пусть система нейтронов характеризуется функцией распределения $f(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{p}, t)$, где

$$dn = f(\boldsymbol{r}, p, t)\, d\boldsymbol{p}\, dV$$

— число нейтронов в элементе объема $dV$ с данным импульсом $\boldsymbol{p}$ в момент времени $t$.

Для функции распределения можно написать кинетическое уравнение, характеризующее изменение функции распределения в конфигурационном пространстве и в пространстве импульсов во времени. Напишем его в виде баланса частиц, входящих и выходящих в 1 *сек* из элемента фазового объема $d\Gamma$.

Именно, имеем

$$\frac{df}{dt}d\Gamma = \left\{ \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{ст}} + q(\boldsymbol{r}, t) \right\} d\Gamma, \tag{30,1}$$

где $q(\boldsymbol{r}, t)$ — мощность источников, поставляющих нейтроны, т. е. $q(\boldsymbol{r}, t)$ — число нейтронов, возникающих в 1 *см*$^3$ в точке $\boldsymbol{r}$ в одну секунду.

В результате соударений нейтроны выходят из данного элемента фазового пространства и входят в него. При энергиях нейтронов, достаточно больших по сравнению с тепловыми скоростями движения ядер, движением последних можно пренебречь и считать их неподвижными. Всякое соударение нейтрона с данным импульсом с ядром выводит его из объема $d\Gamma$. Напишем число этих соударений, как

$$-\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{ст}} = \frac{f}{\tau}, \tag{30,2}$$

где $\tau$ — полное время свободного пробега до столкновения.

Представим его в виде

$$\frac{1}{\tau} = \frac{v}{l_t} = v\left(\frac{1}{l_c} + \frac{1}{l_{sc}}\right),$$

где $l_t$, $l_c$ и $l_{sc}$ — соответственно полная длина свободного пробега, длина пробега до захвата и до рассеяния.

В элемент $d\Gamma$ из-за столкновений попадают те нейтроны, которые имели другой (больший по абсолютной величине) импульс и упруго рассеялись на ядрах:

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{ст}} = n_0 \int v' \sigma(\boldsymbol{p}, \boldsymbol{p}_1) f(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{p}_1, t)\, d\boldsymbol{p}_1, \tag{30,3}$$

где $\sigma(\boldsymbol{p}, \boldsymbol{p}_1)$ — эффективное сечение рассеяния от импульса $\boldsymbol{p}$ к импульсу $\boldsymbol{p}_1$ и $n_0$ — число рассеивающих центров (ядер) в единице объема.

Учитывая (30,2) и (30,3), можно написать уравнение Больцмана (30,1) в виде

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \boldsymbol{v}\frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{r}} + \frac{f}{\tau} = n_0 \int v\sigma(\boldsymbol{p}, \boldsymbol{p}_1) f(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{p}_1, t)\, d\boldsymbol{p}_1 + q. \tag{30,4}$$

Уравнение (30,4) является линейным, поскольку мы пренебрегаем соударениями нейтронов между собой.

В физике нейтронов имеется две основные проблемы: 1) получение распределения нейтронов по энергиям (если энергия нейтронов, поступающих из источников, известна) и 2) нахождение пространственного распределения нейтронов с данной энергией.

Мы рассмотрим сначала первую задачу. Поскольку нас не будет интересовать пространственное распределение нейтронов,

проинтегрируем уравнение (30,4) по всему пространству и обозначим

$$\int f(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{p}, t)\, dV = N(\boldsymbol{p}, t), \qquad \int q(\boldsymbol{r}, t)\, dV = Q. \tag{30,5}$$

При этом получаем, очевидно:

$$\frac{\partial N}{\partial t} + \frac{N}{\tau} = n_0 \int v'\sigma N(\boldsymbol{p}_1, t)\, d\boldsymbol{p}_1 + Q. \tag{30,6}$$

Интеграл $\int \frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{r}} dV$ по всему пространству обращается в нуль. Чтобы не усложнять выкладок, мы ограничимся случаем источника, стационарно испускающего нейтроны с энергией $E_0$. В этом случае $Q$ не зависит от времени $Q = \frac{Q_0 \delta(E_0)}{4\pi}$. При этом (30,6) превращается в стационарное уравнение

$$\frac{N}{\tau} = n_0 \int v'\sigma(\boldsymbol{p}, \boldsymbol{p}_1) N(\boldsymbol{p}_1) d\boldsymbol{p}_1 + \frac{Q_0 \delta(E_0)}{4\pi}. \tag{30,7}$$

Удобнее записать (30,7) в виде

$$\psi(\boldsymbol{p}) = \int \psi(\boldsymbol{p})\, w(\boldsymbol{p}, \boldsymbol{p}_1) \frac{l_t}{l_{sc}}\, d\boldsymbol{p}_1 + \frac{Q_0 \delta(E_0)}{4\pi}, \tag{30,8}$$

где вспомогательная функция

$$\psi(\boldsymbol{p}) = \frac{N(\boldsymbol{p})}{\tau}, \tag{30,9}$$

и $w(\boldsymbol{p}, \boldsymbol{p})$ — вероятность перехода, нормированная на единицу:

$$\int w(\boldsymbol{p}, \boldsymbol{p}_1)\, d\boldsymbol{p} = 1. \tag{30,10}$$

Очевидно, что

$$\frac{w(\boldsymbol{p}, \boldsymbol{p}_1)}{l_{sc}} = n_0 \sigma(\boldsymbol{p}, \boldsymbol{p}_1).$$

Необходимо теперь написать явное значение для вероятности перехода $w(\boldsymbol{p}, \boldsymbol{p}_1)$. Поскольку нейтроны взаимодействуют с ядрами только на весьма малых расстояниях, упругое рассеяние происходит по законам упругих соударений и является изотропным. Поэтому

$$w(\boldsymbol{p}, \boldsymbol{p}_1) = \varphi(p)\, \delta\left(\frac{p_1^2}{2m} - \frac{p^2}{2m} - \frac{(\boldsymbol{p}_1 - \boldsymbol{p})^2}{2M}\right), \tag{30,11}$$

где аргумент $\delta$-функции выражает закон сохранения энергии при столкновении с неподвижным ядром, а $\varphi(p)$ — некоторая функция энергии нейтрона $\frac{p^2}{2m}$. Через $M$ обозначена масса ядра. Значение $\varphi(p)$ может быть найдено из условия (30,10).

Выполняя интегрирование, получаем

$$\int \delta\left(\frac{p_1^2-p^2}{2m}-\frac{(\boldsymbol{p}_1-\boldsymbol{p})^2}{2M}\right)p_1^2\,dp_1\sin\theta\,d\theta\,d\varphi=$$

$$=\int \delta\left(\frac{p_1^2}{2}\left(\frac{1}{m}-\frac{1}{M}\right)-\frac{p^2}{2}\left(\frac{1}{m}+\frac{1}{M}\right)+\frac{pp_1\cos\theta}{M}\right)p_1^2\,dp_1\sin\theta\,d\theta\,d\varphi=$$

$$=\frac{2\pi M}{p}\int\limits_{p_{\min}}^{p_{\max}} p_1\,dp_1=\frac{\pi M}{p}\left(p_{\max}^2-p_{\min}^2\right).$$

Здесь $p_{\min}$ и $p_{\max}$ — минимальный и максимальный импульсы до соударения, который после соударения превращается в импульс $p$.

Согласно законам упругих соударений [ср. (43,33) ч. I]

$$p_{\min}=\frac{M-m}{M+m}\,p,\quad p_{\max}=p.$$

Поэтому окончательно

$$\int\varphi(\boldsymbol{p}_1)\,\delta\,d\boldsymbol{p}_1=\varphi(p)\,\frac{4\pi mM}{(m+M)^2}\,p=1,$$

откуда

$$\varphi=\frac{(M+m)^2}{4\pi mM^2p}$$

и нормированная вероятность рассеяния приобретает вид

$$w(\boldsymbol{p},\boldsymbol{p}_1)=\frac{1}{4\pi}\left(\frac{M+m}{M}\right)^2\frac{1}{mp}\,\delta\left(\frac{p_1^2-p^2}{2m}-\frac{(\boldsymbol{p}_1-\boldsymbol{p})^2}{2M}\right).\qquad(30,12)$$

Задача об интегрировании уравнения (30,8) при значении $w(\boldsymbol{p},\boldsymbol{p}_1)$, даваемом формулой (30,12), весьма сложна. Мы ограничимся поэтому двумя предельными случаями. Во-первых, рассмотрим рассеяние нейтрона на ядрах водорода, т. е. случай $m=M$.

При этом

$$w(p,p_1)=\frac{1}{\pi Mp}\,\delta\left(\frac{p_1^2-p^2-(p_1-p)^2}{2M}\right).\qquad(30,13)$$

Подставляя (30,13) в (30,8), замечаем прежде всего, что ввиду изотропии рассеяния функция $\psi$ не зависит от углов и зависит только от абсолютной величины импульса, так что (30,8) приобретает вид

$$\psi(p)=2\int\limits_0^p\psi(p_1)\,\frac{l_t(p_1)}{l_{sc}(p_1)}\,\frac{p_1\,dp_1}{p^2}+\frac{Q_0\delta(E_0)}{4\pi}\qquad(30,14)$$

или переходя к новой переменной — энергии, можно представить (30,14) в форме

$$\psi(E)=\int\limits_0^E \psi(E_1)\frac{l_t(E_1)}{l_{sc}(E_1)}\frac{dE_1}{E}+\frac{Q_0\delta(E_0)}{4\pi}. \tag{30,15}$$

Это уравнение решается элементарно. Дифференцирование дает

$$\frac{d\psi}{dE}=\left[\frac{l_t(E)}{l_{sc}(E)}-1\right]\frac{\psi(E)}{E}+\frac{Q_0}{4\pi}\left[\frac{\delta(E_0)}{E}+\delta'(E_0)\right].$$

Решением этого линейного уравнения служит

$$\psi=\frac{Q_0}{4\pi}\frac{l_t(E_0)}{l_{sc}(E_0)}\exp\left\{-\int\limits_{E_0}^{E}\frac{l_t(E_1)}{l_{sc}(E_1)}\frac{dE_1}{E_1}\right\}. \tag{30,16}$$

Из (30,9) следует для функции распределения по энергиям

$$N(E)=\frac{Q_0}{4\pi}\frac{l_t(E_0)}{l_{sc}(E_0)}\frac{l_t(E)}{v}\exp\left\{-\int\limits_{E_0}^{E}\frac{l_t(E_1)}{l_{sc}(E_1)}\frac{dE_1}{E_1}\right\}. \tag{30,17}$$

Если поглощение отсутствует, $l=l_t=l_{sc}$ и (30,17) упрощается:

$$N(E)=\frac{Q_0}{4\pi}\frac{l}{v}\frac{1}{E}. \tag{30,18}$$

Уравнение (30,8) существенно упрощается также в другом предельном случае при рассеянии нейтронов на тяжелых ядрах. В этом случае передача энергии при каждом соударении мала.

Для упрощения выкладок ограничимся случаем, когда можно пренебречь поглощением нейтронов в процессе их замедления в среде. При этом, однако, можно рассмотреть общий случай немонохроматических источников. При отсутствии поглощения $l_t=l_{sc}$ и уравнение (30,8) приобретает вид

$$\psi(\mathbf{p})=\int\psi(\mathbf{p}_1)\,w(\mathbf{p},\mathbf{p}_1)\,d\mathbf{p}_1+\frac{Q(E)}{4\pi}. \tag{30,19}$$

Поскольку нас интересует лишь энергетический спектр замедляющихся нейтронов, можно проинтегрировать (30,19) по всем углам. При этом оказывается удобным перейти от абсолютной величины импульса к новой независимой переменной[1])

$$u=\ln\frac{E_0}{E}=2\ln\frac{p_0}{p}. \tag{30,20}$$

Основание для выбора такой переменной будет ясно видно из дальнейших вычислений.

[1]) А. И. Ахиезер и И. Я. Померанчук, Некоторые вопросы теории ядра, Гостехиздат, 1950.

Определим новую неизвествую функцию $\psi(u)$ соотношением

$$\psi(u)=\int \psi(p)\,d\Omega. \qquad (30,21)$$

Положим также

$$w\,dp_1=\eta(u,\mu)\,du\,d\Omega.$$

Простое преобразование дает

$$\eta(u,\mu)=\eta(u,p_1,p)=$$
$$=\frac{(M+m)^2}{8\pi Mm}e^{-u}\delta\left(\cos\mu-\frac{M+m}{2m}e^{-\frac{u}{2}}+\frac{M-m}{2m}e^{\frac{u}{2}}\right).$$

Интегрируя (30,19) по всем углам, находим

$$\psi_0(u)=\int_0^u du'\psi_0(u')\int\eta(u-u',\mu)\,d\Omega. \qquad (30,22)$$

Внутренний интеграл с $\delta$-функцией легко вычисляется, если учесть, что энергия нейтрона при упругом соударении после соударения $E'$ лежит в интервале (ср. § 43 ч. I).

$$E_{\max}=E\geqslant E'\geqslant\left(\frac{M-m}{M+m}\right)^2 E=E_{\min}.$$

Поэтому, введя величину

$$u_M=\ln\frac{E}{E_{\min}}=2\ln\frac{M+m}{M-m}$$

и выполняя интегрирование по углам в $\delta$-функции, находим

$$\eta_0(u-u')\int\eta(u-u',\mu)\,d\Omega=\begin{cases}\dfrac{M+m}{4mM}e^{-(u-u')} & \text{при } u<u_M,\\ 0 & \text{при } u>u_M.\end{cases} \qquad (30,23)$$

Подставляя (30,23) в (30,22), имеем

$$\psi_0(u)=\int_0^u du'\psi_0(u')\eta_0(u-u')+Q. \qquad (30,24)$$

Уравнение (30,23) может быть решено в замкнутом виде с помощью преобразования Лапласа. Именно, умножим (30,23) на $e^{-zu}$ и проинтегрируем по всем $u$ в пределах $0\leqslant u<\infty$. Тогда находим

$$\int_0^\infty \psi_0(u)e^{-zu}\,du=\int_0^\infty e^{-zu}\,du\int_0^u du'\psi_0(u')\eta_0(u-u')+\int_0^\infty e^{-zu}Q(u)\,du. \qquad (30,25)$$

Изменяя порядок интегрирования в двухкратном интеграле, находим

$$\int_0^\infty du'\psi_0(u')\, e^{-zu'} \cdot \int_u^\infty e^{-z(u-u')}\eta(u-u')\, du' =$$

$$= \int du'\psi_0(u')\, e^{-zu'} \cdot \int_0^\infty e^{-zu}\eta(u)\, du. \qquad (30{,}26)$$

Обозначим трансформанты по Лапласу через

$$\tilde{\psi}(z) = \int_0^\infty \psi_0(u)\, e^{-zu}\, du, \qquad (30{,}27)$$

$$\tilde{\eta}(z) = \int_0^\infty \eta(u)\, e^{-zu}\, du, \qquad (30{,}28)$$

$$\tilde{Q}(z) = \int_0^\infty Q(u)\, e^{-zu}\, du \qquad (30{,}29)$$

и учитывая (30,25), получаем окончательно вместо (30,24)

$$\tilde{\psi}(z) = \tilde{\psi}(z)\,\tilde{\eta}(z) + \tilde{Q}(z). \qquad (30{,}30)$$

Отсюда для трансформанты $\tilde{\psi}$ находим

$$\tilde{\psi}(z) = \frac{\tilde{Q}(z)}{1-\tilde{\eta}(z)}. \qquad (30{,}31)$$

Обращая преобразование Лапласа, находим искомое распределение нейтронов в виде

$$\psi_0(u) = \frac{1}{2\pi i}\int_{\sigma-i\infty}^{\sigma+i\infty} \tilde{\eta}(z)\, e^{zu}\, du = \frac{1}{2\pi i}\int_{\sigma-i\infty}^{\sigma+i\infty} \frac{\tilde{Q}(z)\, e^{zu}\, du}{1-\tilde{\eta}(z)}. \qquad (30{,}32)$$

Найдем трансформанту $\tilde{\eta}(z)$. Согласно (30,23) имеем

$$\tilde{\eta}(z) = \frac{(M+m)^2}{4mM}\int_0^{u_M} e^{-u}e^{-zu}\, du = \frac{(M+m)^2}{4mM}\cdot\frac{1-e^{u_M(1+z)}}{1+z} =$$

$$= \frac{1}{1-e^{-u_M}}\,\frac{1-e^{-u_M(1+z)}}{1+z}. \qquad (30{,}33)$$

Подставляя (30,33) в (30,32), приходим к несколько громоздкой формуле для распределения нейтронов по энергиям (точнее, по

логарифмам энергии):

$$\psi_0(u) = \frac{1}{2\pi i} \int\limits_{\sigma - i\infty}^{\sigma + i\infty} \frac{\tilde{Q}(z)\, e^{zu}\, du}{1 - \frac{1}{1 - e^{-u_M}} \cdot \frac{1 - e^{-u_M(1+z)}}{1+z}}. \qquad (30,34)$$

Интегрирование ведется по прямой, параллельной мнимой оси и лежащей правее всех полюсов подынтегрального выражения. Контур можно замкнуть полуокружностью бесконечно большого радиуса, лежащей влево от прямой. Тогда к интегралу можно применить теорему о вычетах. Обычно можно считать $\tilde{Q}(z)$ функцией, не имеющей полюсов. Тогда полюсами подынтегрального выражения являются точки, определяемые условием

$$\left(1 - e^{-u_M}\right)(1 + z) = 1 - e^{-u_M(1+z)}. \qquad (30,35)$$

Это трансцендентное уравнение имеет, очевидно, корень $z_1 = 0$, а также бесконечное множество корней $z_k$, имеющих отрицательную вещественную часть.

Находя вычет от подынтегрального выражения (30,34) и применяя теорему о вычетах, находим

$$\psi_0(u) = \sum \frac{\left[1 - e^{-u_M(1+z_k)}\right] e^{uz_k} \tilde{Q}(z_k)}{1 - e^{-u_M} + u_M e^{-u_M(1+z_k)}}. \qquad (30,36)$$

При больших значениях $u$, т. е. при энергиях нейтронов значительно меньших, чем та, с которой они поставляются источниками, формула (30,36) значительно упрощается. Поскольку вещественное значение $\operatorname{Re} z_k < 0$, все слагаемые в сумме (30,36) при $u \gg 1$ экспоненциально малы по сравнению с первым, отвечающим $z_1 = 0$. Поэтому вместо (30,36) можно написать

$$\psi_0(u) \simeq \frac{1 - e^{-u_M} \tilde{Q}(0)}{1 - e^{-u_M} + u_M e^{-u_M}}. \qquad (30,37)$$

По определению

$$\tilde{Q}(0) = \int\limits_0^\infty Q(u)\, du = Q_0,$$

где $Q_0$ — полное число нейтронов, испускаемых источником за 1 *сек*. Мы видим из (30,37), что $\psi_0(u)$ не зависит от своего аргумента. Именно эта простота функции распределения в переменной и делает удобной эту переменную.

Распределение нейтронов по энергиям имеет вид

$$N(E)=\frac{l}{v}\psi_0=\frac{l}{v}\frac{Q_0}{\xi},$$

где величина $\xi$ по определению равна

$$\xi=\frac{1-e^{-u_M}+e^{-u_M}u_M}{1-u_M}.$$

Эта величина, как показывает простое рассмотрение, представляет среднелогарифмическую потерю энергии нейтрона при одном соударении.

## § 31. Пространственное распределение нейтронов

Обсудим теперь важную проблему о пространственном распределении нейтронов.

Допустим, что можно пренебречь изменением энергии нейтронов при рассеянии на ядрах. Это имеет место, например, для нейтронов, замедлившихся до энергии $\sim kT$ (так называемых тепловых нейтронов). Если пренебречь изменением энергии, то в уравнении (30,4) энергию можно считать фиксированной. Если источники поставляют нейтроны в среду стационарным образом, то установится стационарное распределение нейтронов в пространстве. Функцию распределения можно считать зависящей только от координат и направления движения нейтронов. Последнее можно характеризовать единичным вектором

$$\boldsymbol{v}_1=\frac{\boldsymbol{v}}{v}. \qquad (31,1)$$

Функция распределения нейтронов удовлетворяет уравнению:

$$\boldsymbol{v}\frac{\partial f(\boldsymbol{r},\boldsymbol{v}_1)}{\partial \boldsymbol{r}}+\frac{v}{l_t}f(\boldsymbol{r},\boldsymbol{v}_1)=\int\frac{v}{l_{sc}}w(\boldsymbol{v}_1,\boldsymbol{v}_1')f(\boldsymbol{v}_1',\boldsymbol{r})\,d\Omega'+\frac{q(\boldsymbol{r})}{4\pi}. \qquad (31,2)$$

В интеграле столкновений интегрирование ведется только по углам, поскольку абсолютная величина импульса при столкновениях не изменяется.

Сокращая (31,2) на $\frac{v}{l_t}$ и вводя обозначения

$$\frac{\alpha}{4\pi}=\frac{l_t}{l_{sc}},\qquad s(r)=q\cdot\frac{l_t}{v}, \qquad (31,3)$$

имеем

$$\boldsymbol{v}_1 l_t\frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{r}}+f=\frac{\alpha}{4\pi}\int w(\boldsymbol{v}_1,\boldsymbol{v}_1')f\,d\Omega'+\frac{s(\boldsymbol{r})}{4\pi}. \qquad (31,4)$$

Уравнение (31,4) сходно с уравнением для функции распределения молекул легкого газа, диффундирующего в тяжелом

(§ 24). Важное отличие, однако, заключается в наличии источников частиц и их поглощения в среде.

В тех случаях, когда рассеяние можно считать изотропным $w(v_1, v_1') = 1$, уравнение (31,4) допускает точное решение. Исходя из точного решения уравнения (31,4), можно найти распределение плотности нейтронов в пространстве. Сравнивая его с распределением, полученным в диффузионном приближении, найденном в § 24, мы сможем оценить точность последнего.

Для получения точного решения удобно воспользоваться методом разложения в интеграл Фурье.

Написав

$$\psi(\boldsymbol{k}, v_1) = \frac{1}{(2\pi)^3}\int e^{-i\boldsymbol{kr}} f(\boldsymbol{r}, v_1)\,dV, \qquad \varphi(\boldsymbol{k}) = \frac{1}{(2\pi)^3}\int e^{-i\boldsymbol{kr}} s(\boldsymbol{r})\,dV$$

имеем

$$(1 + i\boldsymbol{k}\boldsymbol{v}_1 l_t)\,\psi(\boldsymbol{k}, v_1) = \frac{\varphi(\boldsymbol{k})}{4\pi} + \frac{\alpha}{4\pi}\int \psi(\boldsymbol{k}, v_1)\,d\Omega'$$

или

$$\psi(\boldsymbol{k}, v_1) = \frac{\varphi(\boldsymbol{k}) + \alpha\int \psi(\boldsymbol{k}, v_1)\,d\Omega'}{4\pi(1 + i\boldsymbol{k}\boldsymbol{v}_1 l_t)}. \tag{31,5}$$

Интегрируя (31,5) по углам, получим

$$\int \psi(\boldsymbol{k}, v_1)\,d\Omega = \frac{\varphi(\boldsymbol{k}) + \alpha\int \psi(\boldsymbol{k}, v_1)\,d\Omega'}{4\pi}\int \frac{d\Omega'}{(1 + i\boldsymbol{k}\boldsymbol{v}_1 l_t)}. \tag{31,6}$$

Последний интеграл вычисляется непосредственно

$$\int \frac{d\Omega}{1 + i\boldsymbol{k}\boldsymbol{v}_1 l_t} = 2\pi\int_0^\pi \frac{\sin\theta\,d\theta}{1 + ikl_t\cos\theta} = \frac{2\pi}{ikl_t}\ln\frac{1 + ikl_t}{1 - ikl_t} = \frac{4\pi}{kl_t}\operatorname{arctg} kl_t.$$

Подставляя это значение в (31,6), получаем

$$\int \psi(\boldsymbol{k}, v_1)\,d\Omega = \frac{\varphi(\boldsymbol{k})}{\dfrac{kl_t}{\operatorname{arctg} kl_t} - \alpha}. \tag{31,7}$$

Заметим теперь, что интеграл, стоящий в левой части (31,6), представляет не что иное, как фурье-компоненту плотности нейтронов

$$N(\boldsymbol{r}) = \int f(\boldsymbol{r}, v_1)\,d\Omega = \frac{1}{(2\pi)^3}\int \psi(\boldsymbol{k}, v_1)\,e^{i\boldsymbol{kr}}\,d\Omega\,d\boldsymbol{k} =$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^3}\int e^{i\boldsymbol{kr}}\,d\boldsymbol{k}\int \psi(\boldsymbol{k}, v_1)\,d\Omega, \tag{31,8}$$

где $N(r)$ — число нейтронов в единице объема среды. Подставляя (31,7) в (31,8), находим

$$N(\boldsymbol{r}) = \int e^{i\boldsymbol{kr}} \left( \int \psi(\boldsymbol{k}, v_1)\, d\Omega \right) d\boldsymbol{k} = \int \frac{\varphi(\boldsymbol{k})\, e^{i\boldsymbol{kr}}\, d\boldsymbol{k}}{\dfrac{kl_t}{\operatorname{arctg} kl_t} - \alpha}. \qquad (31,9)$$

Для получения конкретного выражения для плотности нейтронов, рассмотрим случай точечного источника

$$s(\boldsymbol{r}) = s_0 \delta(\boldsymbol{r}).$$

Тогда

$$\varphi(\boldsymbol{k}) = \frac{l_t}{v} \frac{s_0}{(2\pi)^3}$$

и

$$N(\boldsymbol{r}) = \frac{l_t}{v} \frac{s_0}{(2\pi)^3} \int \frac{e^{ikr\cos\theta} k^2\, dk \sin\theta\, d\theta\, d\varphi}{\dfrac{kl_t}{\operatorname{arctg} kl_t} - \alpha} =$$

$$= \frac{l_t}{irv} \frac{s_0}{(2\pi)^2} \int\limits_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{ikr} k\, dk}{\dfrac{kl_t}{\operatorname{arctg} kl_t} - \alpha}. \qquad (31,10)$$

Вычисление интеграла удобно выполнить в комплексной области. Рассмотрим интеграл по контуру, изображенному на рис. 40.

$$I = \int \frac{e^{i\beta z} z\, dz}{\dfrac{z}{\operatorname{arctg} z} - \alpha}. \qquad (31,11)$$

Подынтегральное выражение в (31,11) имеет полюс первого порядка в точке

$$\frac{z_1}{\operatorname{arctg} z_1} = \alpha \qquad (31,12)$$

и точку ветвления

$$z_2 = i.$$

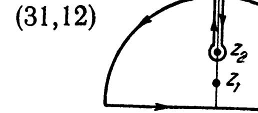


Рис. 40.

Контур обходит точку ветвления, интеграл по большой и малой окружностям обращаются в нуль и остается лишь вычет в точке $z_1$ и интеграл по мнимой оси

$$I = 2\pi i \operatorname{Re}(z_1) + \int\limits_{i}^{i\infty} \frac{e^{i\beta z} z\, dz}{\dfrac{z}{\operatorname{arctg} z} - \alpha}.$$

Оценки [1]) показывают, что на больших расстояниях от источника ($r \gg l_t$) второе слагаемое мало́ по сравнению с первым и интеграл по мнимой оси мы просто отбросим.

[1]) А. Д. Галанин, Теория ядерных реакторов, Атомиздат, 1957.

Обозначим через $i/L$ корень уравнения (31,12), т. е. положим

$$\frac{il_t}{L} = \alpha \operatorname{arctg} \frac{il_t}{L}. \tag{31,13}$$

Тогда, вычисляя вычет в точке (31,13) и подставляя значение $I$ в (31,10), получаем

$$N(\boldsymbol{r}) = \frac{l_t}{v} \frac{s_0}{2\pi\alpha L^2} \frac{1 - \dfrac{l_t^2}{L^2}}{\alpha + \dfrac{l_t^2}{L^2} - 1} \frac{e^{-r/L}}{r}. \tag{31,14}$$

Рассмотрим случай малого поглощения $l_t \simeq l_{sc}$. В трансцендентном уравнении (31,13) можно разложить арктангенс в ряд и написать приближенное его решение в виде

$$L^2 \simeq L_0^2 = \frac{1}{3} l_c l_{sc}. \tag{31,15}$$

При этом очевидно, что $l \gg l_{sc}$. Тогда (31,14) приобретает вид

$$N(r) \simeq \frac{3s_0}{4\pi l_{sc} v} \frac{e^{-r/L_0}}{r}. \tag{31,16}$$

Интересно сравнить пространственное распределение частиц (31,16) с распределением частиц в диффузионном приближении. В диффузионном приближении решение уравнения Больцмана согласно (24,17) приводит к коэффициенту диффузии $D = \frac{l_s v}{3}$. Функция распределения $N(r)$ удовлетворяет при этом уравнению

$$D \Delta N(\boldsymbol{r}) - \frac{N(\boldsymbol{r})}{\tau} = \frac{s_0}{4\pi} \delta(\boldsymbol{r}),$$

где $\tau = \frac{l_c}{v}$. Решение его в точности совпадает с (31,16) при $l_c \ll l_{sc}$. Таким образом, в случае слабого поглощения точное решение кинетического уравнения оказывается с большой степенью точности совпадает с решением уравнения диффузионного приближения на больших расстояниях от источника $r \gg l_{sc}$. Численное сравнение решений кинетического и диффузионного уравнений показывает, что оба решения практически совпадают на расстояниях от источника, больших чем $2l_{sc}$.

В обратном предельном случае очень сильного поглощения, когда $l_t \sim l_c$, уравнение приводит к значению

$$L \simeq 1{,}05 l_t.$$

Это означает, что $N(r)$ существенно уменьшается на расстоянии $\sim l_t$ от источника. В заключение подчеркнем, что получен-

ные результаты имеют весьма общий характер. Они в равной мере относятся ко всем частицам, движущимся в веществе и испытывающим рассеяние и захват, если только взаимодействие с рассеивающими центрами имеет характер близкодействия.

## § 32. Кинетическое уравнение в плазме без столкновений

Непосредственное применение уравнения Больцмана к плазме требует осторожности. Заряженные частицы в плазме взаимодействуют по закону Кулона, так что силы взаимодействия между ними сравнительно медленно убывают с расстоянием. Поэтому необходимо обсудить те изменения, которые нужно внести в вычисление интеграла столкновений для учета особенностей кулоновских взаимодействий. Мы отложим, однако, это обсуждение до § 33, а пока заметим, что наличие сил дальнодействия может в какой-то мере не только усложнять, но и упрощать задачу. Именно, поскольку силы взаимодействия медленно убывают с расстоянием, в системе заряженных частиц должны возникать коллективные движения, в которых принимают участие сравнительно большие группы частиц.

Можно говорить о коллективных возбуждениях в плазме, в которые вовлекается вся система как целое. При рассмотрении таких крупномасштабных движений можно пренебречь неоднородностями (флуктуациями) в системе и вовсе не учитывать парных столкновений между частицами.

Из теории рассеяния в поле кулоновских сил [см. § 43 ч. I; § 86 ч. V] мы знаем, что существенное отклонение частиц происходит при минимальных значениях прицельного параметра

$$\rho_{\min} \sim \frac{e^2}{mv^2} \sim \frac{e^2}{\bar{\varepsilon}},$$

где $\bar{\varepsilon} \sim kT$ — средняя энергия частиц с температурой $T$. Если имеет место неравенство

$$\rho_{\min} \ll \bar{r} \sim \frac{1}{n^{1/3}}, \tag{32,1}$$

где $\bar{r}$ — среднее расстояние между частицами, а $n$ — их плотность, то роль парных соударений становится сравнительно малой по сравнению с кулоновским взаимодействием частиц на больших, порядка $\bar{r}$, расстояниях. В этом случае в системе частиц с кулоновским взаимодействием характер функции распределения будет определяться в основном не парными столкновениями, а средними силами, действующими на частицы. Полезно заметить что неравенство (32,1) эквивалентно

неравенству

$$\frac{l_D^3}{\bar{r}^3} \gg 1. \qquad (32,1')$$

Это означает, что для малости интеграла столкновений требуется малость плазменного параметра [§ 41 ч. IV]. Последнее в свою очередь эквивалентно приближению дебаевской теории для равновесной плазмы. Таким образом, в том же дебаевском приближении, в каком обычно описываются равновесные свойства плазмы, можно учитывать коллективные взаимодействия, но пренебрегать парными взаимодействиями на малых расстояниях.

Неравенство (32,1) или эквивалентное ему (32,1′) справедливы при малой плотности и высокой температуре плазмы.

К этому же результату можно прийти и с помощью другого рассуждения, основанного на приближении времени релаксации $\tau$. Если в плазме рассматриваются нестационарные процессы с частотой $\omega$, то при

$$\omega \gg \frac{1}{\tau}$$

можно пренебречь интегралом столкновений.

Опуская в кинетическом уравнении интеграл столкновений, можно написать

$$\frac{\partial f_\alpha}{\partial t} + (\boldsymbol{v}\nabla) f_\alpha + \frac{\boldsymbol{F}_\alpha}{m} \nabla_{\boldsymbol{v}} f_\alpha = 0, \qquad (32,2)$$

где индекс $\alpha$ означает сорт частиц (электроны, ионы), а $\boldsymbol{F}_\alpha$ — полную силу, действующую на частицу $\alpha$-го сорта:

$$\boldsymbol{F}_\alpha = e_\alpha \left( \boldsymbol{E} + \frac{1}{c} [\boldsymbol{vH}] \right). \qquad (32,3)$$

При этом мы считаем, что $\mu \cong 1$. Поля $\boldsymbol{E}$ и $\boldsymbol{H}$ в (32,3) представляют поля, действующие на частицу со стороны всех остальных частиц (внутренние поля) плюс приложенные внешние поля. Для простоты рассуждений, мы сначала обсудим случай, когда внешние поля отсутствуют. Поля $\boldsymbol{E}$ и $\boldsymbol{H}$ удовлетворяют системе уравнений Максвелла — Лоренца:

$$\left.\begin{aligned} \operatorname{rot} \boldsymbol{H} &= \frac{1}{c}\frac{\partial \boldsymbol{E}}{\partial t} + \frac{4\pi}{c} \boldsymbol{j} \\ \operatorname{rot} \boldsymbol{E} &= -\frac{1}{c}\frac{\partial \boldsymbol{H}}{\partial t}, \\ \operatorname{div} \boldsymbol{E} &= 4\pi\rho, \\ \operatorname{div} \boldsymbol{H} &= 0, \end{aligned}\right\} \qquad (32,4)$$

Подчеркнем, что мы не можем в нашем приближении рассматривать плазму как сплошную среду и пользоваться уравнениями Максвелла.

Входящие в систему уравнений Максвелла — Лоренца (32,4) плотности заряда и тока представляют средние значения этих величин, взятые по функциям распределения $f_\alpha$:

$$\rho=\sum_\alpha e_\alpha \int f_\alpha(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{v}, t)\, dV, \qquad \boldsymbol{j}=\sum_\alpha e_\alpha \int \boldsymbol{v} f_\alpha(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{v}, t)\, dV. \quad (32,5)$$

Таким образом, система уравнений полей и функций распределения образует замкнутую систему: поля $\boldsymbol{E}$ и $\boldsymbol{H}$ находятся по заданным средним значениям плотностей заряда и тока. Последние зависят от функции распределения $f_\alpha$. Можно сказать, таким образом, что поля $\boldsymbol{E}$ и $\boldsymbol{H}$ определяются функцией распределения $f_\alpha$. В свою очередь функция распределения согласно (32,2) зависит от значений полей $\boldsymbol{E}$ и $\boldsymbol{H}$ в каждой точке плазмы в каждый момент времени. Иными словами, в системе устанавливается такое распределение частиц по скоростям и в пространстве, при котором соответствующие поля поддерживают это распределение. Каждая частица движется в поле, создаваемом всеми частицами, за исключением данной. При этом, разумеется, все частицы являются равноправными. Таким образом, в плазме устанавливается самосогласованное поле [ср. § 41 ч. IV или § 70 ч. V].

Обычно тепловым движением ионов ввиду их большой массы можно пренебречь, и искать функцию распределения только для электронов. При этом совокупность ионов образует положительный заряженный фон, компенсирующий электрический заряд электронов.

Уравнение (32,2) носит название кинетического уравнения с самосогласованным полем. Следует заметить, что качественные рассуждения, положенные в основу его вывода, могут быть дополнены более строгим количественным рассмотрением. При этом оказывается, что кинетическое уравнение с самосогласованным полем получается из цепочки уравнений для корреляционных функций при разложении по малому плазменному параметру $\bar{r}/l_D$ [1]).

Интеграл столкновений оказывается величиной следующего порядка малости в разложении по этому параметру.

Описание неравновесных процессов в плазме в приближении самосогласованного поля позволяет найти целый ряд происходящих в ней явлений.

---

[1]) См., например, Н. Н. Боголюбов, Проблемы динамической теории в статистической физике, Гостехиздат, 1946; К. П. Гуров, Основания кинетической теории, «Наука», 1966.

## § 33. Дисперсия и затухание плазменных волн

Мы рассматривали уже в ч. IV теорию плазменных волн. Мы получили закон дисперсии для плазменных волн, в приближении, когда плазму можно было считать сплошной средой (т. е. в гидродинамическом приближении). Здесь, однако, мы можем существенно уточнить макроскопическую теорию и, в частности, найти закон дисперсии и затухания плазменных волн.

Рассмотрим высокочастотные собственные колебания пространственно-однородной плазмы в отсутствии внешнего электромагнитного поля.

Кинетическое уравнение для функции распределения электронов в приближении самосогласованного поля имеет вид

$$\frac{\partial f}{\partial t}+\boldsymbol{v}\frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{r}}+\frac{e}{m}\left(\boldsymbol{E}+\frac{1}{c}[\boldsymbol{vH}]\right)\frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{v}}=0. \tag{33,1}$$

Тяжелые ионы считаются неподвижными.

Считая поле слабым, будем пытаться искать решение системы уравнений (33,1) и (33,4) в виде

$$f=f_0+f_1, \tag{33,2}$$

где $f_0$ — функция распределения электронов в отсутствие колебаний и

$$f_1 \ll f_0.$$

Подставляя это выражение в (33,1) найдем без труда для $f_1$:

$$\frac{\partial f_1}{\partial t}+\boldsymbol{v}\frac{\partial f_1}{\partial r}+\frac{e}{m}\left(\boldsymbol{E}+\frac{1}{c}[\boldsymbol{vH}]\right)\frac{\partial f_0}{\partial \boldsymbol{v}}=0. \tag{33,3}$$

Здесь $f_1$ является функцией координат, скоростей и времени, т. е.

$$f_1=f_1(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{v}, t).$$

Кинетическое уравнение без интеграла столкновений допускает значительное упрощение. В этом приближении можно считать, что все частицы движутся по заданным траекториям под действием самосогласованного и внешнего полей. Поэтому, если $r_0$ — координата частицы в момент времени $t=0$, то можно написать

$$\boldsymbol{r}=\boldsymbol{r}_0+\int_0^t \boldsymbol{v}\,dt, \tag{33,4}$$

где $\boldsymbol{v}(t)$ определено уравнением движения частицы,

$$\boldsymbol{v}(t)=\boldsymbol{v}_0+\int_0^t \frac{\boldsymbol{F}}{m}\,dt. \tag{33,5}$$

Введём в качестве новых переменных значения $r_0$ и $v_0$. Тогда

$$\left(\frac{\partial f_1}{\partial t}\right)_{r_0,\,v_0}=\left(\frac{\partial f_1}{\partial t}\right)_{r,\,v}+\frac{\partial f_1}{\partial r}\left(\frac{\partial r}{\partial t}\right)_{r_0,\,v_0}+\frac{\partial f}{\partial v}\left(\frac{\partial v}{\partial t}\right)_{r_0,\,v_0}\simeq\left(\frac{\partial f_1}{\partial t}\right)_{r,\,v}+v\frac{\partial f_1}{\partial r}+\frac{F}{m}\frac{\partial f_1}{\partial v}.$$

Здесь мы приняли, что производные $\left(\frac{\partial r}{\partial t}\right)_{r_0,\,v_0}$ и $m\left(\frac{\partial v}{\partial t}\right)_{r_0,\,v_0}$ — точные значения скорости — совпадают со скоростью и действующей силой для невозмущенного движения. Это верно с точностью до величин второго порядка малости. Поскольку указанные величины умножаются на производные от возмущенной функции распределения $f_1$, такая замена законна. Тогда кинетическое уравнение (33,3) приобретает весьма простой вид:

$$\frac{\partial f_1(r_0,\,v_0,\,t)}{\partial t}+\frac{eE(r_0,\,t)}{m}\frac{\partial f_0}{\partial v(t)}=0. \tag{33,6}$$

Последнее уравнение интегрируется непосредственно.

Если принять, что

$$f_1(r_0,\,t)\to 0 \quad \text{при} \quad t\to-\infty,$$

то, интегрируя (33,6) по невозмущенным траекториям, имеем

$$f_1=-\frac{e}{m}\int_{-\infty}^{t}E(r_0,\,t')\frac{\partial f_0}{\partial v(t')}dt'=-\frac{e}{m}\int_{-\infty}^{t}E(r-vt',\,t')\frac{\partial f_0}{\partial v(t')}dt'. \tag{33,7}$$

Еще раз подчеркнем, что столкновения нарушают движение частиц и лишают возможности пользоваться представлением о движении по траекториям. Рассмотрим случай изотропной однородной плазмы, когда возмущением служит поле электромагнитной волны. В отсутствие возмущения $v=v_0=\mathrm{const}$.

В изотропной плазме $f_0$ не зависит от углов. Поэтому в выражении для силы можно было оставить только электрическую силу $eE$ [1]). Разложим поле $E$ в интеграл Фурье.

Тогда для $f_1$ имеем:

$$f_1=-\frac{e}{m}\int dk\int d\omega\int_{-\infty}^{t}E(k,\,\omega)\,e^{i(kr-\omega t')}e^{-ikv(t')t'}\frac{\partial f_0}{\partial v}dt'. \tag{33, 8}$$

[1]) Произведение $[vH]\frac{\partial f_0}{\partial v}=2\,[vH]\,v\frac{\partial f_0}{\partial v^2}=0.$

Поправка к функции распределения, создаваемая отдельной гармоникой поля, имеет вид

$$f_1^{(\boldsymbol{k},\,\omega)} = -\frac{e}{m}\int\limits_{-\infty}^{t} \boldsymbol{E}(\boldsymbol{k},\,\omega)\, e^{i(\boldsymbol{k}\boldsymbol{v}t'-\omega(t'-t))}\,\frac{\partial f_0}{\partial \boldsymbol{v}(t)}\,dt'. \qquad (33{,}9)$$

Зная поправку к функции распределения, можно найти соответствующий ей электрический ток

$$j_i = en\int v_i(t)\, f_1^{(\boldsymbol{k},\,\omega)}\,d\boldsymbol{v} =$$

$$= -\frac{e^2 n}{m} E_l(\boldsymbol{k},\,\omega)\int d\boldsymbol{v}\int\limits_{-\infty}^{t} v_i(t)\,\frac{\partial f_0}{\partial v_l(t')}\, e^{-i[\boldsymbol{k}\boldsymbol{v}t'-\omega(t-t')]}\,dt'. \qquad (33{,}10)$$

Введем новую переменную:

$$\tau = t - t'.$$

Тогда

$$j_i = -\frac{e^2 n}{m} E_l(\boldsymbol{k},\,\omega)\int d\boldsymbol{v}\int\limits_{0}^{\infty} v_i(0)\,\frac{\partial f_0}{\partial v(t-\tau)}\, e^{i(\boldsymbol{k}\boldsymbol{v}(t-\tau)+\omega\tau)}\,d\tau. \qquad (33{,}11)$$

Поскольку время $t$ ничем не выделено, можно положить в интеграле $t = 0$ и ток, генерируемый одной гармоникой поля, оказывается равным

$$j_i = -\frac{e^2 n}{m} E_l(\boldsymbol{k},\,\omega)\int d\boldsymbol{v}\int v_j(0)\,\frac{\partial f_0}{\partial v_j(\tau)}\, e^{i\omega\tau} e^{-i\boldsymbol{k}\boldsymbol{v}\tau}\,d\tau. \qquad (33{,}12)$$

Подчеркнем, что здесь $f_0$ означает функцию распределения электронов в плазме в отсутствие колебаний. Вообще говоря, $f_0$ не является равновесной функцией распределения.

Если, однако, считать, что плазма является равновесной, то $f_0$ представляет распределение Максвелла (нормированное на единицу) и

$$\frac{\partial f_0}{\partial v_j} = \frac{\partial f_M}{\partial v_j} = -\frac{m v_j}{kT} f_M. \qquad (33{,}13)$$

Тогда формула (33,11) приобретает вид

$$j = \frac{e^2 n}{kT} E_j(\boldsymbol{k},\,\omega)\, e^{i(\boldsymbol{k}\boldsymbol{r}-\omega t)}\int d\boldsymbol{v}\int\limits_{0}^{\infty} v_j(0)\, v_j(\tau)\, e^{i(\omega-\boldsymbol{k}\boldsymbol{v})\tau} f_M\,d\tau. \qquad (33{,}14)$$

В § 39 мы обсудим это выражение, имеющее весьма общий характер и связывающее ток с корреляцией скоростей в моменты времени, отделенные промежутком времени $\tau$. Однако в рас-

сматриваемом нами случае, когда внешнее магнитное поле отсутствует, частицы движутся с постоянной скоростью, так что $\boldsymbol{v}(0)=\boldsymbol{v}(\tau)=\text{const}$. Поэтому мы опустим значение аргумента при скорости в дальнейших формулах.

Формула (33,12) дает для тензора электропроводности, определяемого из соотношения $j_i(\omega)=\sigma_{ik}(\omega)E_k(\omega)$, выражение

$$\sigma_{ij}=-\frac{e^2n}{m}\int d\boldsymbol{v}\int v_i\frac{\partial f_0}{\partial v_j}e^{i(\omega-\boldsymbol{k}\boldsymbol{v})\tau}\,d\tau. \tag{33,15}$$

Согласно общей формуле (33,20) ч. IV, т. I диэлектрическая проницаемость $\varepsilon_{ij}$ имеет вид

$$\varepsilon_{ij}=\delta_{ij}+i\frac{4\pi}{\omega}\sigma_{ij}=\delta_{ij}-i\frac{4\pi e^2n}{m\omega}\int d\boldsymbol{v}\int v_i\frac{\partial f}{\partial v_j}e^{i(\omega-\boldsymbol{k}\boldsymbol{v})\tau}\,d\tau \tag{33,16}$$

или, для равновесной плазмы,

$$\varepsilon_{ij}=\delta_{ij}+i\frac{4\pi e^2n}{\omega kT}\int f_M\,d\boldsymbol{v}\int v_iv_je^{i(\omega-\boldsymbol{k}\boldsymbol{v})\tau}\,d\tau=$$

$$=\delta_{ij}+i\frac{4\pi e^2n}{\omega kT}Av\left\{\int v_iv_je^{i(\omega-\boldsymbol{k}\boldsymbol{v})\tau}d\tau\right\}, \tag{33,17}$$

где $Av\{\quad\}$ означает усреднение по максвелловскому распределению.

Выберем направление вектора $\boldsymbol{k}$ за ось $z$. Тогда легко видеть, что в изотропной плазме, которую мы рассматриваем, отличны от нуля только три компоненты тензора $\varepsilon_{ij}$, перпендикулярные к направлению распространения волны,

$$\varepsilon_{\perp}=\varepsilon_{xx}=\varepsilon_{yy}=1+i\frac{4\pi e^2n}{\omega kT}\left(\overline{v_x^2}\right)\left\langle\int\limits_0^\infty e^{i(\omega-kv_z)\tau}\,d\tau\right\rangle=1+i\frac{4\pi e^2n}{\omega m}\langle I_1\rangle \tag{33,18}$$

и параллельная этому направлению

$$\varepsilon_{\parallel}=\varepsilon_{zz}=1+i\frac{4\pi e^2n}{\omega kT}\left\langle v_z^2\int\limits_0^\infty e^{i(\omega-kv_z)\tau}\,d\tau\right\rangle=1+i\frac{4\pi e^2n}{kT\omega}\langle I_2\rangle, \tag{33,19}$$

где $\langle\quad\rangle$ означают среднее по компоненте скорости $v_z$, так что

$$\langle I_1\rangle=\left(\frac{m}{2\pi kT}\right)^{1/2}\int\limits_{-\infty}^{\infty}e^{-\frac{mv_z^2}{2kT}}\left(\int\limits_0^\infty e^{i(\omega-kv_z)\tau}\,d\tau\right)dv_z, \tag{33,20}$$

$$\langle I_2\rangle=\left(\frac{m}{2\pi kT}\right)^{1/2}\int\limits_{-\infty}^{\infty}v_z^2e^{-\frac{mv_z^2}{2kT}}\left(\int\limits_0^\infty e^{i(\omega-kv_z)\tau}\,d\tau\right)dv_z. \tag{33,21}$$

Зная продольную и поперечную компоненты тензора диэлектрической проницаемости, можно найти закон дисперсии продольных и поперечных волн (см. § 33 ч. IV). Именно, закон дисперсии продольных волн определится условием

$$\varepsilon_{\parallel} = 0, \tag{33,22}$$

тогда как закон дисперсии поперечных волн получается из соотношения

$$\varepsilon_{\perp} - \frac{k^2c^2}{\omega^2} = 1 + i\frac{2\pi e^2 n}{m\omega}\langle I_1\rangle - \frac{k^2c^2}{\omega^2} = 0. \tag{33,23}$$

Мы начнем с рассмотрения дисперсии продольных волн. С учетом (33,22) и (33,19) находим трансцендентное уравнение, связывающее $\omega$ и $k$:

$$1 + i\frac{4\pi e^2 n}{kT\omega}\langle I_2\rangle = 0. \tag{33,24}$$

Найдем прежде всего интеграл по переменной $\tau$. Для того чтобы этот интеграл имел определенный смысл, его нужно рассматривать как предел

$$I_1 = \int_0^\infty e^{i(\omega - kv_z)\tau}\,d\tau = \lim_{\gamma\to 0}\int_0^\infty e^{-\gamma\tau}e^{i(\omega - kv_z)\tau}\,d\tau.$$

Как угодно малое значение $\gamma$ обеспечивает сходимость интеграла на верхнем пределе.

Тогда получаем

$$\int_0^\infty e^{i(\omega - kv_z)\tau}\,d\tau = \lim_{\gamma\to 0}\frac{i}{(\omega - kv_z) + i\gamma}. \tag{33,25}$$

Мы должны теперь вычислить среднее значение от (33,25), т. е. интеграл

$$\langle I_1\rangle = \frac{i}{\sqrt{\pi}\,kv_0}\int_{-\infty}^\infty e^{-\left(\frac{v}{v_0}\right)^2}\frac{d\left(\frac{v}{v_0}\right)}{\frac{i\gamma}{kv_0} + \left(\frac{\omega}{kv_0} - \frac{v}{v_0}\right)} = \frac{i}{\sqrt{\pi}\,kv_0}\int_{-\infty}^\infty \frac{e^{-x^2}\,dx}{z - x}, \tag{33,26}$$

где $x = \frac{v}{v_0}$, $z = \frac{\omega}{kv_0} + \frac{i\gamma}{kv_0}$, $v_0 = \left(\frac{2kT}{m}\right)^{1/2}$. Вместо $v_z$ мы написали просто $v$. Воспользуемся тождеством, справедливым при $\operatorname{Im} z > 0$:

$$\frac{i}{z - x} = \int_0^\infty e^{i(z - x)\alpha}\,d\alpha.$$

Тогда находим

$$\langle I_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{\pi}\,kv_0}\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2}\int_0^{\infty} e^{i(z-x)\alpha}\,dx\,d\alpha =$$

$$= \frac{1}{\sqrt{\pi}\,kv_0}\int_0^{\infty} e^{iz\alpha-\frac{\alpha^2}{4}}\,d\alpha \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\left(x+\frac{i\alpha}{2}\right)^2}\,dx =$$

$$= \frac{1}{kv_0}\int_0^{\infty} e^{iz\alpha-\frac{\alpha^2}{4}}\,d\alpha = \frac{e^{-z^2}}{kv_0}\int_0^{\infty} e^{-\left(\frac{\alpha}{2}-iz\right)^2}\,d\alpha =$$

$$= \frac{2e^{-z^2}}{kv_0}\left\{\int_0^{\infty} e^{-t^2}\,dt - \int_0^{-iz} e^{-t^2}\,dt\right\} = \frac{\sqrt{\pi}}{kv_0}\,e^{-z^2}\left(1+\frac{2i}{\sqrt{\pi}}\int_0^{z} e^{w^2}\,dw\right) =$$

$$= \frac{\sqrt{\pi}}{kv_0}\,e^{-z^2} + \frac{2i}{kv_0}\,e^{-z^2}\int_0^{z} e^{w^2}\,dw.$$

В последней формуле можно совершить переход к пределу $\gamma \to 0$. Тогда получаем окончательно

$$\langle I_1\rangle = \frac{\sqrt{\pi}}{kv_0}\,e^{-\left(\frac{\omega}{kv_0}\right)^2} + \frac{2i}{kv_0}\,e^{-\left(\frac{\omega}{kv_0}\right)^2}\int_0^{\frac{\omega}{kv_0}} e^{w^2}\,dw.$$

Очевидно, что $\frac{\omega}{k} = c_{ф}$ — фазовая скорость распространения волн, так что $z = \frac{\omega}{kv_0}$ представляет отношение этой скорости к средней скорости теплового движения электронов $\bar{v} = v_0\sqrt{2}$.

При $c_{ф} \gg v_0$ можно написать

$$\int_0^{z} e^{w^2}\,dw = \int_0^{z} e^{(z-t^2)}\,dt = e^{z^2}\int_0^{z} e^{-2zt}e^{t^2}\,dt = e^{z^2}\int_0^{z} e^{-2zt}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{t^{2n}}{n!}\,dt \simeq$$

$$\simeq e^{z^2}\sum_{n=0}^{\infty}\int_0^{\infty} e^{-2zt}\,\frac{t^{2n}}{n!}\,dt = \frac{e^{z^2}}{2z}\left(1+\frac{1}{2z^2}+\ldots\right), \qquad (33{,}27)$$

откуда

$$\langle I_1\rangle \cong \frac{\sqrt{\pi}}{kv_0}\,e^{-\left(\frac{\omega}{kv_0}\right)^2} + \frac{i}{\omega}\left[1+\frac{1}{2}\left(\frac{kv_0}{\omega}\right)^2+\ldots\right]. \qquad (33{,}28)$$

Для вычисления среднего значения в формуле (33,21) воспользуемся свойством интеграла $I_1$, вытекающим из его определения (33,25)

$$(\omega - kv_z)\,I_1 = i$$

или

$$v_z \cdot I_1 = \frac{\omega I_1}{k} - \frac{i}{k}.$$

Аналогично,

$$(\omega - kv_z)^2 I_1 = i(\omega - kv_z)$$

или

$$v_z^2 I_1 = \frac{\omega^2 I_1}{k^2} - \frac{i\omega}{k^2} - \frac{ikv_z}{k^2}. \quad (33,29)$$

Усредняя (33,29), находим

$$\langle I_2 \rangle = \langle v_z^2 I_1 \rangle = \frac{\omega^2}{k^2} \langle I_1 \rangle - \frac{i\omega}{k^2}.$$

Подставляя значение $(I_1)$ из (33,28) при $c_ф \gg v_0$, получаем окончательно

$$\langle I_2 \rangle \simeq \frac{\omega^2}{k^2} \frac{\sqrt{\pi}}{(kv_0)} e^{-\left(\frac{\omega}{kv_0}\right)^2} + \frac{i}{\omega} \left(\frac{\omega^2}{k^2}\right) \frac{(kv_0)^2}{2\omega^2}. \quad (33,30)$$

Подставляя значение $\langle I_2 \rangle$ в (33,24), приходим к следующему закону дисперсии продольных волн:

$$1 + i \frac{2\sqrt{\pi}\, \omega_0^2}{\omega^2} \left(\frac{\omega}{kv_0}\right)^3 e^{-\left(\frac{\omega}{\omega_0}\right)^2} - \frac{\omega_0^2}{\omega^2} = 0, \quad (33,31)$$

где $\omega_0^2 = \frac{4\pi e^2 n}{m}$ — плазменная (ленгмюровская) частота.

В том же приближении решение уравнения (33,31) гласит:

$$\omega \simeq \omega_0 (1 + i\delta), \quad (33,32)$$

где декремент затухания $\delta$ равен

$$\delta = \sqrt{\pi} \left(\frac{\omega_0}{kv_0}\right)^2 e^{-\left(\frac{\omega_0}{kv_0}\right)^2} = \frac{\sqrt{\pi}}{2\sqrt{2}} \frac{1}{(kl_D)^3} \cdot e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{1}{kl_D}\right)^2}, \quad (33,33)$$

где $l_D$ — дебаевская длина.

Существование в плазме продольных волн с частотой $\omega_0$ и фазовой скоростью $c_ф = \frac{\omega_0}{k}$ было установлено нами в § 46 ч. IV, где плазма рассматривалась в приближении сплошной среды. Новым результатом является затухание плазменных волн. На первый взгляд этот результат представляется парадоксальным. Выше мы видели, что диссипативные процессы были связаны с молекулярными столкновениями и возникающим при этом обменом импульсом. Найденное выше затухание плазменных волн (так называемое затухание Ландау) имеет другую природу.

Электроны в плазме могут иметь компоненту скорость $v_z$ как меньшую, так и большую, чем фазовая скорость волны $c_\varphi$. На первые частицы действует поле опережающей их волны. Передавая импульс, волна увлекает их за собой. Наоборот, частицы, движущиеся быстрее волны, теряют импульс, отдавая его волне. Только частицы, скорость которых $v_z = c_\varphi$, находятся в резонансе с волной. Они движутся в одной фазе с волной, не теряя и не приобретая импульса. Продольная волна стремится исказить распределение Максвелла, создав максимум, отвечающий скорости $v_z$, равной фазовой скорости $c_\varphi$.

Известно, однако, что в ансамбле частиц, распределенных по Максвеллу, число частиц со скоростью меньше данной больше, чем число частиц со скоростью большей данной. Поэтому число частиц, увлекаемых волной, превышает число частиц, передающих импульс волне. В итоге имеет место затухание, а не раскачка продольных волн.

Формула (33,33) показывает, что затухание $\delta$ мало́ для длин волн, существенно превышающих дебаевскую длину. Наоборот, существование плазменных волн с $\lambda < l_D$ невозможно: коэффициент затухания таких волн становится большим единицы.

Это обстоятельство еще раз показывает, что продольные волны в плазме представляют коллективный эффект, связанный с кулоновским взаимодействием заряженных частиц.

Совершенно аналогичные вычисления, основанные на использовании уравнения (33,23) и выражения для $\langle I_1 \rangle$, приводят к следующему выражению для частоты поперечных волн:

$$\omega^2 = \omega_0^2 + k^2c^2 > \omega_0^2. \qquad (33,34)$$

Их фазовая скорость оказывается больше скорости света в пустоте:

$$c_\varphi = \frac{\omega}{k} = c\sqrt{1 + \frac{\omega_0^2}{c^2k^2}}\,. \qquad (33,35)$$

Для вычисления коэффициента затухания поперечных волн следовало бы учесть релятивистские эффекты. Ясно, однако, что эффект затухания мал, поскольку фазовая скорость волн столь велика по сравнению со скоростями всех электронов в плазме, что все их можно считать покоящимися.

Мы не останавливаемся здесь на весьма важном в практическом отношении вопросе о поведении плазмы во внешнем электромагнитном поле. Метод интегрирования кинетического уравнения при наличии внешнего магнитного поля в принципе не отличается от приведенного, но требует более громоздких выкладок.

По этой же причине мы не рассматриваем задачу о плазменных волнах с учетом движения тяжелых ионов.

## § 34. Кинетическое уравнение в плазме с учетом столкновений

Рассмотрение плазмы в приближении самосогласованного поля оказывается недостаточным для описания ряда процессов в плазме.

К ним принадлежат прежде всего релаксационные процессы — установление максвелловского распределения, а также выравнивание средних энергий электронов и ионов. Приближение самосогласованного поля недостаточно также для вычисления кинетических коэффициентов диффузии, вязкости и т. п.

В достаточно разреженной плазме можно учитывать только парные соударения и пользоваться обычным кинетическим уравнением Больцмана, но с видоизмененным интегралом столкновений. Последнее обстоятельство связано со свойствами кулоновского взаимодействия. Поскольку силы кулоновского взаимодействия медленно спадают с расстоянием, основной вклад в интеграл соударений дают столкновения, при которых частицы рассеиваются на малые углы. Действительно, при кулоновском взаимодействии эффективное сечение расходится при малых углах рассеяния (см. § 43 ч. I и § 85 ч. V).

При рассеянии на малые углы изменение импульсов сталкивающихся частиц мало́. Поэтому можно сказать, что основную роль играют такие столкновения, при которых в каждом акте происходит сравнительно малый обмен импульсами. Этим можно воспользоваться для преобразования интеграла столкновений.

Удобно ввести новые переменные в выражение для интеграла столкновений:

$$I = \int w(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}, \mathbf{p}_3, \mathbf{p}_2)\,[f(\mathbf{p}_3)\,f(\mathbf{p}_2) - f(\mathbf{p})\,f(\mathbf{p}_1)]\,d\mathbf{p}_1\,d\Omega. \tag{34,1}$$

Положим, что изменение импульса первой частицы

$$\mathbf{p}_2 - \mathbf{p} = \mathbf{q}. \tag{34,2}$$

Из закона сохранения импульса следует

$$\mathbf{p}_3 - \mathbf{p}_1 = -\mathbf{q}.$$

Сделаем замену переменных, положив

$$\mathbf{p}_2 \to \frac{\mathbf{p}_2 + \mathbf{p}}{2}; \quad \mathbf{p}_3 \to \frac{\mathbf{p}_3 + \mathbf{p}_1}{2};$$

$$\mathbf{p}_1 \to \mathbf{p}_3 - \mathbf{p}_1; \quad \mathbf{p} \to \mathbf{p}_2 - \mathbf{p}.$$

Тогда очевидно, что

$$w(\mathbf{p}_3, \mathbf{p}_2, \mathbf{p}_1, \mathbf{p}) \to w\left(\frac{\mathbf{p}_3 + \mathbf{p}_1}{2}, \frac{\mathbf{p}_2 + \mathbf{p}}{2}, \mathbf{p}_3 - \mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2 - \mathbf{p}\right) \equiv$$

$$\equiv w\left(\mathbf{p} + \frac{\mathbf{q}}{2}; \mathbf{p}_1 - \frac{\mathbf{q}}{2}; -\mathbf{q}; \mathbf{q}\right).$$

Поскольку вероятность перехода инвариантна относительно замены $\boldsymbol{q}\to(-\boldsymbol{q})$, в силу принципа детального равновесия можно просто записать

$$w(\boldsymbol{p}_3, \boldsymbol{p}_2, \boldsymbol{p}_1, \boldsymbol{p})\to w\left(\boldsymbol{p}+\frac{\boldsymbol{q}}{2}, \boldsymbol{p}_1-\frac{\boldsymbol{q}}{2}, \boldsymbol{q}\right).$$

Имеем при такой замене переменных

$$f(\boldsymbol{p}_3)f(\boldsymbol{p}_2)=f(\boldsymbol{p}+\boldsymbol{q})f(\boldsymbol{p}_1-\boldsymbol{q}). \qquad (34,3)$$

Тогда интеграл столкновений приобретает вид

$$I=\int w(\boldsymbol{p}+\boldsymbol{q}/2, \boldsymbol{p}_1-\boldsymbol{q}/2, \boldsymbol{q})[f(\boldsymbol{p}+\boldsymbol{q})f(\boldsymbol{p}_1-\boldsymbol{q})-f(\boldsymbol{p}_1)f(\boldsymbol{p})]\,d\boldsymbol{p}_1\,d\boldsymbol{\Omega}. \qquad (34,4)$$

Воспользуемся теперь тем, что относительное изменение импульса при столкновении $\boldsymbol{q}$ мало́ и разложим в ряд по степеням $\boldsymbol{q}$ функцию распределения $f$ и вероятность перехода $\boldsymbol{w}$, удерживая в разложении члены не выше второго порядка малости. При этом получаем

$$f(\boldsymbol{p}+\boldsymbol{q})\cong f(\boldsymbol{p})+\frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{p}}\boldsymbol{q}+\frac{1}{2}\frac{\partial^2 f}{\partial p^i\,\partial p^k}q_iq_k,$$

$$f(\boldsymbol{p}_1-\boldsymbol{q})\cong f_1(\boldsymbol{p}_1)-\frac{\partial f_1}{\partial \boldsymbol{p}_1}\boldsymbol{q}+\frac{1}{2}\frac{\partial^2 f_1}{\partial p_1^i\,\partial p_1^k}q_iq_k,$$

$$[f(\boldsymbol{p}+\boldsymbol{q})f(\boldsymbol{p}_1-\boldsymbol{q})-f(\boldsymbol{p}_1)f(\boldsymbol{p})]\cong\left(f_1\frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{p}}-f\frac{\partial f_1}{\partial \boldsymbol{p}_1}\right)\boldsymbol{q}+$$
$$+\left(f_1\frac{\partial^2 f}{\partial p^i\,\partial p^k}+f\frac{\partial^2 f_1}{\partial p_1^i\,\partial p_1^k}-2\frac{\partial f_1}{\partial p_1^i}\frac{\partial f}{\partial p^k}\right)\frac{q_iq_k}{2},$$

$$w\left(\boldsymbol{p}+\frac{\boldsymbol{q}}{2}, \boldsymbol{p}_1-\frac{\boldsymbol{q}}{2}, \boldsymbol{q}\right)\cong w(\boldsymbol{p}, \boldsymbol{p}_1)+\left(\frac{\partial w}{\partial \boldsymbol{p}}-\frac{\partial w}{\partial \boldsymbol{p}_1}\right)\frac{\boldsymbol{q}}{2}=$$
$$=w+\left(\frac{\partial w}{\partial \boldsymbol{p}}-\frac{\partial w}{\partial \boldsymbol{p}_1}\right)\frac{\boldsymbol{q}}{2}.$$

Подставляя эти выражения в интеграл столкновений, находим

$$I=\int w\left(f_1\frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{p}}-f\frac{\partial f_1}{\partial \boldsymbol{p}_1}\right)\boldsymbol{q}\,d\boldsymbol{p}_1\,d\boldsymbol{\Omega}+\int\frac{\partial w}{\partial p^i}\left(f_1\frac{\partial f}{\partial p^k}-f\frac{\partial f_1}{\partial p_1^k}\right)\frac{q_iq_k}{2}\,d\boldsymbol{p}_1\,d\boldsymbol{\Omega}-$$
$$-\int\frac{\partial w}{\partial p_1^i}\left(f_1\frac{\partial f}{\partial p^k}-f\frac{\partial f_1}{\partial p_1^k}\right)\frac{q_iq_k}{2}\,d\boldsymbol{p}_1\,d\boldsymbol{\Omega}+$$
$$+\int w\left(f_1\frac{\partial^2 f}{\partial p^i\,\partial p^k}+f\frac{\partial^2 f_1}{\partial p_1^i\,\partial p_1^k}-2\frac{\partial f_1}{\partial p_1^i}\cdot\frac{\partial f}{\partial p^k}\right)\frac{q_iq_k}{2}\,d\boldsymbol{p}_1\,d\boldsymbol{\Omega}. \qquad (34,5)$$

В силу четности функции $w$ относительно замены $\boldsymbol{q}\to-\boldsymbol{q}$ и нечетности подынтегрального выражения в первом интеграле, он обращается в нуль.

Третий интеграл можно преобразовать интегрированием по частям:

$$\int \frac{\partial w}{\partial p_1^i}\left(f_1 \frac{\partial f}{\partial p^k} - f \frac{\partial f_1}{\partial p_1^k}\right)\frac{q_i q_k}{2}\, d\boldsymbol{p}_1\, d\Omega =$$
$$= -\int w\left(\frac{\partial f_1}{\partial p_1^k}\frac{\partial f}{\partial p^k} - f \frac{\partial^2 f_1}{\partial p_1^i \partial p_1^k}\right)\frac{q_i q_k}{2}\, d\boldsymbol{p}_1\, d\Omega. \quad (34,6)$$

Поскольку функция распределения быстро уменьшается с ростом аргумента, проинтегрированные члены обращаются в нуль при $|\boldsymbol{p}_1| \to \infty$.

Подставляя (34,6) в (34,5), находим для интеграла столкновений:

$$I = \int \left\{ \frac{\partial w}{\partial p^i}\left(f_1 \frac{\partial f}{\partial p^k} - f \frac{\partial f_1}{\partial p_1^k}\right) - w\left(\frac{\partial f_1}{\partial p_1^i}\frac{\partial f}{\partial p^k} - f \frac{\partial^2 f_1}{\partial p_1^i \partial p_1^k}\right) + \right.$$
$$\left. + w\left(f_1 \frac{\partial^2 f}{\partial p^i \partial p^k} + f \frac{\partial^2 f_1}{\partial p_1^i \partial p_1^k} - 2\frac{\partial f_1}{\partial p_1^i}\frac{\partial f}{\partial p^k}\right)\right\}\frac{q_i q_k}{2}\, d\boldsymbol{p}_1\, d\Omega =$$
$$= \int \left\{ \frac{\partial w}{\partial p^i}\left(f_1 \frac{\partial f}{\partial p^k} - f \frac{\partial f_1}{\partial p_1^k}\right) - w \frac{\partial f_1}{\partial p_1^i}\frac{\partial f}{\partial p^k} + w f_1 \frac{\partial^2 f}{\partial p^i \partial p^k}\right\}\frac{q_i q_k}{2}\, d\boldsymbol{p}_1\, d\Omega =$$
$$= \int \left\{ \frac{\partial}{\partial p^i}\left[w\left(f_1 \frac{\partial f}{\partial p^k} - f \frac{\partial f_1}{\partial p_1^k}\right)\right]\right\}\frac{q_i q_k}{2}\, d\boldsymbol{p}_1\, d\Omega =$$
$$= -\frac{\partial}{\partial p^i}\int w\left(f \frac{\partial f_1}{\partial p_1^k} - f_1 \frac{\partial f}{\partial p^k}\right)\frac{q_i q_k}{2}\, d\boldsymbol{p}_1\, d\Omega = -\frac{\partial j_i}{\partial p^i}, \quad (34,7)$$

где введено обозначение:

$$j_i = \int w\left(f \frac{\partial f_1}{\partial p_1^k} - f_1 \frac{\partial f}{\partial p^k}\right)\frac{q_i q_k}{2}\, d\boldsymbol{p}_1\, d\Omega. \quad (34,8)$$

Мы свели интеграл столкновений к дивергенции вектора $j_i$, представляющего поток в пространстве импульсов. Смысл этого результата становится понятным, если учесть результаты § 10. При изменении переменной, в данном случае импульса, малыми порциями, изменение функции распределения сводится к потоку в соответствующем пространстве, в нашем случае в пространстве импульсов.

Кинетическое уравнение приобретает вид

$$\frac{\partial f(\boldsymbol{p}, \boldsymbol{r}, t)}{\partial t} + \boldsymbol{v}\frac{\partial f(\boldsymbol{p}, \boldsymbol{r}, t)}{\partial \boldsymbol{r}} + \frac{\boldsymbol{F}}{m}\frac{\partial f(\boldsymbol{p}, \boldsymbol{r}, t)}{\partial \boldsymbol{p}} = -\frac{\partial j_i}{\partial p^i}. \quad (34,9)$$

Это уравнение именуется кинетическим уравнением Ландау. Очевидно, что кинетическое уравнение Ландау является част-

ным случаем уравнения медленных процессов (уравнения Фоккера — Планка). В данном случае медленным процессом является обмен импульсами между частицами с кулоновским взаимодействием.

Дальнейшее упрощение выражения для потока импульса получается, если провести интегрирование по углам. Для этого мы воспользуемся тем, что главную роль играют далекие столкновения, при которых отклонение происходит на малые углы.

Введем тензор

$$\alpha_{ik} = \int w \frac{q_i q_k}{2} d\Omega. \tag{34,10}$$

С помощью этого тензора выражение для $j_i$ можно представить в виде

$$j_i = \int \alpha_{ik} \left( f \frac{\partial f_1}{\partial p_1^k} - f_1 \frac{\partial f}{\partial p^k} \right) d\boldsymbol{p}_1. \tag{34,11}$$

Изменение импульса при отклонении на малые углы было вычислено нами в § 43 ч. I. Если выбрать направление относительной скорости двух сталкивающихся частиц за ось $x$-ов, то имеем очевидно, что

$$q_x = 0; \quad q_y = q_z = \int \frac{\partial}{\partial y} \frac{e_1 e_2}{r} dt = \frac{2 e_1 e_2}{\rho v_{\text{отн}}}, \tag{34,12}$$

где $\rho$ — прицельный параметр и $e_1$, $e_2$ — заряды частиц. В общем случае вектор $\boldsymbol{q}$ можно записать в виде

$$\boldsymbol{q} = \frac{2 e_1 e_2}{\rho^2 v_{\text{отн}}} \boldsymbol{\rho}. \tag{34,13}$$

При этом очевидно, что вектор $\boldsymbol{\rho}$ перпендикулярен к вектору относительной скорости $\boldsymbol{v}_{\text{отн}}$. Пользуясь (34,13), запишем (34,10) в виде

$$\alpha_{ik} = \frac{2 (e_1 e_2)^2}{v_{\text{отн}}^2} \int \frac{w \rho_i \rho_k}{\rho^4} d\Omega. \tag{34,14}$$

Вероятность столкновения $w$ с рассеянием в угол $d\Omega$ можно записать в виде

$$w \, d\Omega = dw = v_{\text{отн}} \rho \, d\rho \, d\varphi, \tag{34,15}$$

где $\varphi$ — азимутальный угол столкновения (угол, определяющий ориентацию вектора $\boldsymbol{\rho}$ в плоскости, перпендикулярной к вектору $\boldsymbol{v}_{\text{отн}}$).

Учитывая это значение $w$ и (34,14), получаем

$$\alpha_{ik} = \frac{2 (e_1 e_2)^2}{v_{\text{отн}}} \int \frac{\rho_i \rho_k}{\rho^3} d\varphi \, d\rho.$$

В выбранной нами системе координат можно, очевидно, написать

$$\rho_x = 0; \quad \rho_y = \rho \sin \varphi; \quad \rho_z = \rho \cos \varphi.$$

Поэтому для компонент $\alpha_{ik}$ получаем окончательно

$$\alpha_{xx} = \alpha_{xy} = \alpha_{xz} = \alpha_{yz} = 0, \quad \alpha_{yy} = \alpha_{zz} = \frac{2\pi (e_1 e_2)^2}{v_{\text{отн}}} \int \frac{d\rho}{\rho}. \qquad (34{,}16)$$

Интеграл по прицельным расстояниям логарифмически расходится как на верхнем, так и на нижнем пределе. Пределы интегрирования — значения параметра $\rho_{\max}$ и $\rho_{\min}$, — можно определить из следующих соображений: при далеких пролетах, когда $\rho$ превышает дебаевскую длину $l_D$, заряженные частицы экранированы и практически не взаимодействуют. Поэтому можно положить верхний предел $\rho_{\max} \simeq l_D$.

Нижний предел определяется из условия, чтобы углы рассеяния не были слишком велики. Именно, если кинетическая энергия $\mu \frac{v_{\text{отн}}^2}{2}$ велика по сравнению с потенциальной $\frac{e_1 e_2}{\rho}$, то отклонения сравнительно малы.

Граница области малых отклонений определяется условием

$$\frac{\mu v_{\text{отн}}^2}{2} \sim \frac{e_1 e_2}{\rho_{\min}}$$

или

$$\rho_{\min} \sim \frac{2 e_1 e_2}{\mu v_{\text{отн}}^2}.$$

Таким образом, окончательно

$$\alpha_{yy} = \alpha_{zz} = \frac{2\pi (e_1 e_2)^2}{v_{\text{отн}}} \ln \frac{\mu v_{\text{отн}}^2 l_D}{2 (e_1 e_2)}.$$

Следует заметить, что величина, стоящая под логарифмом, очень велика, так что числовое значение самого логарифма не очень чувствительно к определению параметров $\rho_{\max}$ и $\rho_{\min}$.

В произвольной системе координат $\alpha_{ik}$ записывают в виде

$$\alpha_{ik} = 2\pi (e_1 e_2)^2 \frac{v_{\text{отн}}^2 \delta_{ik} - v_{\text{отн}}^i v_{\text{отн}}^k}{v_{\text{отн}}^3} \ln \frac{p_{\max}}{p_{\min}}. \qquad (34{,}17)$$

Окончательно получаем

$$\frac{\partial f}{\partial t} + v_k \frac{\partial f}{\partial r_k} + \frac{F_k}{m} \frac{\partial f}{\partial p^k} =$$

$$= -2\pi (e_1 e_2)^2 \ln \frac{\rho_{\max}}{\rho_{\min}} \frac{\partial}{\partial p^i} \int \frac{v_{\text{отн}}^2 \delta_{ik} - v_{\text{отн}}^i v_{\text{отн}}^k}{v_{\text{отн}}^3} \left( f \frac{\partial f_1}{\partial p_1^k} - f_1 \frac{\partial f}{\partial p^k} \right) dp_1. \qquad (34{,}18)$$

В плазме, всегда состоящей из нескольких сортов частиц, уравнения Ландау следует записать для функции распределения каждого сорта частиц.

Заметим прежде всего, что в состоянии равновесия уравнение Ландау допускает решение в виде распределения Максвелла

$$f = \text{const}\, e^{-p^2/2mkT}. \tag{34,19}$$

Действительно, при подстановке (34,19) в уравнение Ландау его левая часть обращается в нуль.

В правой части имеем:

$$\int \frac{v_{\text{отн}}^2 \delta_{ik} - v_{\text{отн}}^i v_{\text{отн}}^k}{v_{\text{отн}}^3} \left( f \frac{\partial f_1}{\partial p_1^k} - f_1 \frac{\partial f}{\partial p^k} \right) dp_1 =$$

$$= \int \frac{v_{\text{отн}}^2 \delta_{ik} - v_{\text{отн}}^i v_{\text{отн}}^k}{v_{\text{отн}}^3} \left( \frac{p_1^k - p^k}{mkT} \right) f f_1\, dp_1 = \frac{1}{kT} \int \frac{v_{\text{отн}}^k \delta_{ik} - v_{\text{отн}}^i}{v_{\text{отн}}} f f_1\, dp_1.$$

Ясно, однако, что

$$v_{\text{отн}}^k \delta_{ik} - v_{\text{отн}}^i = 0.$$

Таким образом, распределение Максвелла является решением уравнения Ландау для случая равновесия. Можно показать, что из уравнения Ландау следует $H$-теорема. Поэтому распределение Максвелла является тем единственным распределением, которое устанавливается в равновесной плазме. Наконец, из уравнения Ландау вытекают уравнения гидродинамики плазмы и могут быть найдены соответствующие кинетические коэффициенты. Мы не можем, однако, останавливаться на этих довольно громоздких вычислениях.

## § 35. Установление равновесия в электронно-ионной плазме

Благодаря существенному различию в массах ионов и электронов электронно-ионная плазма представляет классический пример системы, могущей находиться в состоянии неполного равновесия.

Столкновения между ионами приводят к установлению равновесного максвелловского распределения с некоторой температурой $T^{(i)}$ за время $\tau_i$. Аналогично, за время $\tau_e$ установится равновесное распределение электронов, которым, согласно сказанному в предыдущем параграфе, также служит максвелловское распределение. Однако температура электронов будет иметь другое значение $T^{(e)}$, причем $T^{(e)} \gg T^{(i)}$.

Плазма с различными температурами ионов и электронов находится в состоянии неполного равновесия. По прошествии

времени $\tau \gg \tau_i$, $\tau_e$ в плазме установится полное равновесие с общей температурой для обоих сортов частиц.

Это равновесие устанавливается путем передачи энергии от электронов к ионам. Время релаксации $\tau$ определяется равенством

$$\frac{d\overline{\varepsilon^{(i)}}}{dt} = Q^{(e\to i)}, \tag{35,1}$$

где $\overline{\varepsilon^{(i)}} = \frac{3}{2} kT_i$ — средняя энергия ионов и $Q^{(e\to i)}$ — поток энергии от электронов к ионам.

Очевидно, что

$$\frac{d\overline{\varepsilon^{(i)}}}{dt} = \frac{d}{dt}\int \varepsilon^{(i)} f^{(i)}\, d\boldsymbol{p}^{(i)} = \int \varepsilon^{(i)} \frac{\partial f^{(i)}}{\partial t}\, d\boldsymbol{p}^{(i)},$$

поскольку функция распределения ионов $f^{(i)}$ не зависит от координат. Согласно (34,9) функция распределения удовлетворяет кинетическому уравнению

$$\frac{\partial f^{(i)}}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial p_k^{(i)}} j_k^{(e,\, i)}. \tag{35,2}$$

Интеграл столкновений $j_k^{(i,\, i)} = 0$, поскольку между ионами существует равновесие.

Подставляя (35,2) в (35,1) и интегрируя по частям, имеем

$$\frac{d\overline{\varepsilon^{(i)}}}{dt} = -\int \varepsilon^{(i)} \frac{\partial j_k^{(e,\, i)}}{\partial p_k^{(i)}}\, d\boldsymbol{p}^{(i)} = \int v_k^{(i)} j_k^{(e,\, i)}\, d\boldsymbol{p}^{(i)}. \tag{35,3}$$

Поток импульса от электронной к ионной компоненте может быть записан, согласно (34,11), в виде

$$j_k^{(e,\, i)} = \int \alpha_{kj}\left(f_0^{(e)} \frac{\partial f_0^{(i)}}{\partial p_j^{(i)}} - f_0^{(i)} \frac{\partial f_0^{(e)}}{\partial p_j^{(e)}}\right) d\boldsymbol{p}^{(e)}. \tag{35,4}$$

Поскольку $f_0^{(e)}$ и $f_0^{(i)}$ — равновесные функции распределения с температурами $T^{(e)}$ и $T^{(i)}$, находим

$$j_k^{(e,\, i)} = \int \alpha_{jk} f_0^{(e)} f_0^{(i)} \left(\frac{v_j^{(i)}}{kT^{(i)}} - \frac{v_j^{(e)}}{kT^{(e)}}\right) d\boldsymbol{p}^{(e)}. \tag{35,5}$$

Введем относительную скорость

$$v_{\text{отн}}^{j} = v_j^{(e)} - v_j^{(i)}.$$

Тогда

$$j_k^{(e,\,i)} = \int \alpha_{kj} f_0^{(e)} f_0^{(i)} \left\{ v_j^{(i)} \left( \frac{1}{kT^{(i)}} - \frac{1}{kT^{(e)}} \right) - \frac{v_{\text{отн}}^{j}}{kT^{(e)}} \right\} dp^{(e)}.$$

Имеем, однако,

$$\alpha_{kj} v_{\text{отн}}^{j} \simeq v_{\text{отн}}^{j} v_{\text{отн}}^{2} \delta_{kj} - v_{\text{отн}}^{2} v_{\text{отн}}^{k} = 0.$$

Поэтому находим

$$j_k^{(e,\,i)} = \frac{2\pi e^4 Z^2}{k} \ln \frac{\rho_{\max}}{\rho_{\min}} \left( \frac{1}{T^{(i)}} - \frac{1}{T^{(e)}} \right) \int f_0^{(i)} f_0^{(e)} v_j^{(i)} \frac{v_{\text{отн}}^2 \delta_{kj} - v_{\text{отн}}^k v_{\text{отн}}^j}{v_{\text{отн}}^3} dp^{(e)}.$$

Поскольку скорость электронов велика по сравнению со скоростями ионов, можно положить

$$\boldsymbol{v}_{\text{отн}} \simeq \boldsymbol{v}^{(e)}.$$

Тогда окончательно

$$j_k^{(e,\,i)} = \frac{2\pi e^4 Z^2}{k} \frac{T^{(e)} - T^{(i)}}{T^{(i)} T^{(e)}} \ln \frac{\rho_{\max}}{\rho_{\min}} \int f_0^{(i)} f_0^{(e)} \frac{\delta_{kj} (v^{(e)})^2 - v_k^{(e)} v_j^{(e)}}{(v^{(e)})^3} v_j^{(i)} \, dp^{(e)}. \tag{35,6}$$

Подставляя $j_k^{(e,\,i)}$ из (35,6) и (35,3), получаем

$$\frac{\overline{d\varepsilon^{(i)}}}{dt} = \int v_k^{(i)} j_k^{(e,\,i)} \, dp^{(i)} =$$

$$= 2\pi \frac{e^4 Z^2}{k} \frac{T^{(e)} - T^{(i)}}{T^{(i)} T^{(e)}} \ln \frac{\rho_{\max}}{\rho_{\min}} \int f_0^{(e)} f_0^{(i)} v_k^{(i)} v_j^{(i)} \frac{(v^{(e)})^2 \delta_{kj} - v_k^{(e)} v_j^{(e)}}{(v^{(e)})^3} dp^{(e)} \, dp^{(i)}. \tag{35,7}$$

Имеем, очевидно,

$$v_k^{(i)} v_j^{(i)} (v^{(e)})^2 \delta_{kj} = (v^{(i)})^2 (v^{(e)})^2.$$

Кроме того, ввиду сферической симметрии $f_0^{(i)}$ и $f_0^{(e)}$,

$$\langle v_k^{(e)} v_j^{(e)} \rangle \langle v_k^{(i)} v_j^{(i)} \rangle = 0 \quad \text{при} \quad k \neq j.$$

Поэтому окончательно

$$\frac{\overline{d\varepsilon^{(i)}}}{dt} = 2\pi \frac{e^4 Z^2}{k} \frac{T^{(e)} - T^{(i)}}{T^{(i)} T^{(e)}} \ln \frac{\rho_{\max}}{\rho_{\min}} \cdot \int \frac{(v^{(i)})^2}{v^{(e)}} f_0^{(e)} f_0^{(i)} \, dp^{(e)} \, dp^{(i)}.$$

Дальнейшие выкладки сводятся к простому усреднению по распределениям Максвелла ионов и электронов:

$$\langle (v^{(i)})^2 \rangle = \frac{3kT^{(i)}}{m^{(i)}}, \qquad \left\langle \frac{1}{v^{(e)}} \right\rangle = 2 \left( \frac{m^{(e)}}{2\pi k T^{(e)}} \right)^{1/2}.$$

Итак, для $\frac{\overline{d\varepsilon^{(i)}}}{dt}$ получаем

$$\frac{\overline{d\varepsilon^{(i)}}}{dt} = 2\pi \frac{N^2 e^4 Z^2}{k} \ln \frac{\rho_{\max}}{\rho_{\min}} \frac{T^{(e)} - T^{(i)}}{T^{(i)} T^{(e)}} \cdot \frac{3kT^{(i)}}{m^{(i)}} \cdot 2 \left( \frac{m^{(e)}}{2\pi k T^{(e)}} \right)^{1/2}$$

или

$$\frac{dT^{(i)}}{dt} = \frac{T^{(e)} - T^{(i)}}{\tau},$$

где время релаксации

$$\tau = \frac{3m^{(i)}}{4\sqrt{2\pi}\sqrt{m^{(e)}}} \frac{\left(kT^{(e)}\right)^{3/2}}{NZ^2 e^4 \ln \frac{\rho_{\max}}{\rho_{\min}}}.$$

ГЛАВА IV

# МЕТОДЫ ВРЕМЕННЫ́Х КОРРЕЛЯТИВНЫХ ФУНКЦИЙ И ТЕОРИЯ ОНЗАГЕРА

## § 36. Реакция системы на внешнее динамическое возмущение. Классический расчет

До сих пор мы обсуждали только один метод подхода к решению кинетических проблем — метод кинетического уравнения. Сложность основного кинетического уравнения приводит к необходимости для фактического решения кинетических задач переходить к уравнению Больцмана для одночастичной функции распределения.

Уравнение Больцмана, как мы видели на приведенных примерах, а также, как это будет особенно ясно в главе, посвященной теории твердого тела, является мощным методом исследования неравновесных процессов. Однако оно позволяет получать конкретные результаты только для ограниченного класса систем.

В последние годы интенсивно развивается другой метод подхода к решению кинетических проблем.

В работах этого направления физическую кинетику удалось построить по такой же схеме, что и статистическую физику.

Рассмотрим некоторую макроскопическую систему, находящуюся в состоянии статистического равновесия. Равновесные свойства этой системы описываются равновесной матрицей плотности или, в классическом приближении, распределением Гиббса. Предположим теперь, что в момент времени $t \to -\infty$ включается некоторое малое возмущение.

В принципе существуют два различных класса возмущений. Первый из них связан с наложением на систему внешнего поля сил, например, электрического или магнитного полей, зависящих от времени. Такие возмущения мы будем именовать динамическими. При наложении динамического возмущения полный гамильтониан можно представить в виде

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}'(t),$$

где $\hat{H}'(t)$ описывает часть гамильтониана, связанную с действием внешней силы. Таким образом, динамические возмущения являются по своей природе микроскопическими. Они изменяют гамильтониан каждой частицы, входящей в систему.

Возмущения второго класса, часто именуемые термическими возмущениями, имеют по своей природе макроскопический характер и имеют смысл только по отношению к системе как целому или ее макроскопической части. Например, при установлении теплового или диффузионного контакта между телами, соответственно с разной температурой или имеющими различный состав, состояния каждого из тел подвергаются возмущению. Однако такое возмущение нельзя связать с изменением гамильтониана отдельных частиц.

Мы последовательно разберем действие динамических и термических возмущений на равновесную макроскопическую систему. При этом вначале мы ограничимся квазиклассическим приближением, а затем проведем квантовый расчет.

Оказалось, что все кинетические коэффициенты, а следовательно, и потоки могут быть выражены через одну и ту же величину — временну́ю коррелятивную функцию. Таким образом, временна́я коррелятивная функция играет в физической кинетике ту же роль, какую в статистической физике играет функция состояний.

Итак, рассмотрим некоторую классическую квазизамкнутую систему, характеризующуюся функцией распределения Гиббса

$$\rho_0 = \frac{1}{Z} e^{-\beta H_0} \qquad (36,1)$$

в состоянии равновесия.

Возмущенная функция Гамильтона представится в виде

$$H = H_0 + H'(t),$$

где $H'(t) \ll H_0$. Для упрощения выкладок мы положим

$$H' = -A[p(t),\ q(t)] \cdot \delta(t).$$

Это означает, что в момент времени $t = 0$ на систему действует некоторый импульс, тогда как при $t < 0$ и $t > 0$ система не подвергается никаким внешним воздействиям. Найдем изменения, вызываемые в системе приложенным малым динамическим возмущением.

Изменение функции распределения во времени дается общей формулой (15,2)

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \{H;\ \rho\}. \qquad (36,2)$$

Полагая, что возмущенную функцию распределения можно представить в виде

$$\rho = \rho_0 + \rho', \tag{36,3}$$

где $\rho'$ — малая добавка, вызванная возмущением ($\rho' \ll \rho_0$), находим

$$\frac{\partial \rho'}{\partial t} = \{H';\ \rho_0\} + \{H_0;\ \rho'\} = -\{A(p,\ q)\cdot\delta(t);\ \rho_0\} + \{H_0;\ \rho'\} \tag{36,4}$$

или

$$\frac{d\rho'}{dt} = -\{A(p,\ q);\ \rho_0\}\,\delta(t).$$

Интегрируя по времени, получаем

$$\rho' = \rho'(-\infty) - \{A(0);\ \rho_0\} = -\{A(0);\ \rho_0\}, \tag{36,5}$$

где $A(0)$ означает выражение $A[p(t),\ q(t)]$, в котором для координат и импульсов частиц берутся их значения в момент $t = 0$.

По определению скобки Пуассона и в силу (36,1) легко найти

$$\{A(0);\ \rho_0\} = \sum\left(\frac{\partial A}{\partial q}\frac{\partial \rho_0}{\partial p} - \frac{\partial A}{\partial p}\frac{\partial \rho_0}{\partial q}\right) = -\frac{1}{kT}\rho_0\sum\left(\frac{\partial A}{\partial q}\frac{\partial H_0}{\partial p} - \frac{\partial A}{\partial p}\frac{\partial H_0}{\partial q}\right).$$

Но для любой механической величины, зависящей от координат и импульсов, можно написать

$$\dot{A} = \frac{dA}{dt} = \sum\left(\frac{\partial A}{\partial q}\frac{dq}{dt} + \frac{\partial A}{\partial p}\frac{dp}{dt}\right) = \sum\left(\frac{\partial A}{\partial q}\frac{\partial H_0}{\partial p} - \frac{\partial A}{\partial p}\frac{\partial H_0}{\partial q}\right).$$

Поэтому получаем окончательно

$$\rho' = \dot{A}(0)\,\frac{\rho_0}{kT}. \tag{36,6}$$

Зная изменение функции распределения, можно найти изменение среднего значения любой механической величины, описывающей макроскопическую подсистему $B(t)$, вызванное возмущением

$$\langle \Delta B(t)\rangle = \int [B(t)(\rho_0 + \rho') - B(t)\rho_0]\,d\Gamma =$$
$$= \frac{1}{kT}\int \dot{A}(0)\,B(t)\,\rho_0\,d\Gamma = \frac{1}{kT}\langle \dot{A}(0)\,B(t)\rangle. \tag{36,7}$$

Формула (36,7) определяет изменение среднего значения произвольной величины $B$ под действием единичного импульса.

Обозначим это изменение через $\varphi_{BA}$ и назовем его откликом или функцией реакции системы

$$\varphi_{BA}(t) = \frac{1}{kT}\langle \dot{A}(0)\,B(t)\rangle. \tag{36,8}$$

Тогда (36,7) можно записать в виде

$$\langle \Delta B \rangle = \int \varphi_{BA}(t-t')\,\delta(t')\,dt'. \tag{36,9}$$

Рассмотрим теперь весьма общий случай, когда возмущение, действующее на систему, имеет вид

$$H' = -A[p(t),\ q(t)]\cdot F(t), \tag{36,10}$$

где $F(t)$ — некоторая заданная функция времени.

В линейном приближении, т. е. когда возмущение мало́, изменение средних значений под влиянием возмущения (36,10) можно рассматривать как наложение импульсных возмущений и вместо (36,9) написать

$$\langle \Delta B \rangle = \int_{-\infty}^{t} \varphi_{BA}(t-t')\,F(t')\,dt', \tag{36,11}$$

где отклик $\varphi_{BA}$, по-прежнему дается формулой (36,8), так что

$$\langle \Delta B \rangle = -\frac{1}{kT}\int_{-\infty}^{t} \langle \dot{A}(0)\,B(t-t')\rangle\,F(t')\,dt'. \tag{36,12}$$

При этом, однако, необходимо, чтобы $F(t)$ удовлетворяло одному весьма общему требованию:

$$F(t \to -\infty) \to 0. \tag{36,13}$$

Последнее означает, что до включения возмущения система находилась в состоянии равновесия.

Важным частным случаем является случай периодического возмущения. Для того чтобы удовлетворить условию (36,13), можно принять

$$F(t) = \operatorname{Re}\lim_{\delta\to 0} e^{\delta t + i\omega t}. \tag{36,14}$$

Формула (36,14) определяет функцию, которая является практически периодической при всех значениях времени $t$, кроме $t \to -\infty$, когда она обращается в нуль. При этом из (36,11) получаем

$$\langle \Delta B \rangle = \operatorname{Re}\chi_{BA} e^{i\omega t}, \tag{36,15}$$

где

$$\chi_{BA} = \lim_{\delta\to 0}\int_{0}^{\infty} e^{-i\omega t' + \delta t'}\varphi_{BA}\,dt'. \tag{36,16}$$

Последняя величина, представляющая компоненту Фурье от отклика $\varphi_{BA}$, называется обобщенной комплексной восприимчивостью. Ниже мы убедимся, что это определение восприимчи-

вости в случае воздействия электрического и магнитного полей совпадает с определением восприимчивости, данным в электродинамике.

Полученные соотношения имеют ту же степень общности, что и соотношения классической статистической физики.

При малых отклонениях квазизамкнутой системы от состояния равновесия формула (36,6) определяет изменение ее функции распределения, а формула (36,12) — соответствующее изменение средних значений.

Соотношения типа (36,11) являются точными в том смысле, что они не зависят от конкретных физических свойств рассматриваемой неравновесной системы. Таким образом, формула (36,12) определяет отклонение средних значений величин, характеризующих систему от их равновесных значений при воздействии на нее динамических возмущений. Оказывается, что величиной, характеризующей реакцию системы на динамическое возмущение, является временна́я коррелятивная функция $\varphi_{BA} = \langle A(0) B(t) \rangle$. Поскольку усреднение в $\varphi_{BA}$ производится по состояниям равновесной системы, формула (36,12) позволяет найти значения средних для неравновесной по характеристике равновесной системы. Коррелятивная функция или, точнее, функция реакции, для рассматриваемых неравновесных систем играет ту же роль, что функция распределения для равновесных систем.

Однако, и это необходимо иметь в виду, функция распределения имеет универсальный характер. Наоборот, функция реакции зависит от природы возмущения — величины $\dot{A}(0)$.

Прежде чем перейти к получению формулы (36,12) в квантовой статистике, а также к разбору приложений общей теории, сделаем еще одно замечание о сущности формулы (36,12).

Она, как и формулы для вычисления средних в статистике, имеет смысл только для достаточно больших систем ($N \to \infty$, $V \to \infty$, $\frac{N}{V}$ — конечно). Кроме того, время $t$ необходимо считать как угодно большим, т. е. знать реакцию системы на возмущение после его включения за достаточно большое время.

Функция $\varphi_{BA}$ инвариантна относительно замены $t \to (-t)$:

$$\varphi_{BA} = \frac{1}{kT} \langle \dot{A}(0) B(t) \rangle = \frac{1}{kT} \langle \dot{A}(0) B(-t) \rangle,$$

поскольку $B(t) = B(-t)$.

Наоборот, $\langle \Delta B \rangle$ при достаточно больших временах не инвариантна относительно этой замены. Это очевидно из простого физического рассуждения. Если $t^*$ — время, прошедшее после

включения возмущения, а $t > t^*$, то $\langle B(-t)\rangle$ — реакция системы на возмущение, которое еще на нее не действовало!

Таким образом, выражение для $\langle \Delta B\rangle$ оказывается необратимым при достаточно больших временах и для достаточно больших систем.

Полученные соотношения можно переписать в более удобном виде, если воспользоваться условием

$$\frac{d}{dt}\langle A(0)\,B(t)\rangle = \left\langle \frac{d}{dt}(A(0)\,B(0))\right\rangle = 0. \qquad (36{,}17)$$

Последнее означает, что средняя равновесная скорость изменения корреляции двух произвольных величин равна нулю. Это условие выражает стационарный характер рассматриваемых процессов.

С учетом (36,17) можно написать

$$\varphi_{BA} = -\frac{1}{kT}\langle A(0)\,\dot{B}(t)\rangle \qquad (36{,}18)$$

и, соответственно,

$$\langle \Delta B\rangle = -\frac{1}{kT}\int_{-\infty}^{t}\langle A(0)\,\dot{B}(t-t')\rangle\,F(t')\,dt'. \qquad (36{,}19)$$

Преобразуем формулу (36,19) по Фурье. Обозначим

$$F(\omega) = \int_{0}^{\infty} F(t)\,e^{-i\omega t}\,dt,$$

$$\langle I(\omega)\rangle = \int_{0}^{\infty}\langle \Delta B\rangle\,e^{-i\omega t}\,dt =$$

$$= -\frac{1}{kT}\int_{-\infty}^{t} dt'\cdot F(t')\int_{0}^{\infty}\langle A(0)\,\dot{B}(t-t')\rangle\,e^{-i\omega t}\,dt =$$

$$= -\frac{1}{kT}\int_{0}^{\infty}\int_{0}^{\infty} du\,\langle A(0)\,\dot{B}(u)\rangle\,F(t-u)\,e^{-i\omega(t-u)}e^{-i\omega u}\,dt.$$

Тогда (36,19) можно представить в виде

$$\langle I(\omega)\rangle = \gamma(\omega)\,F(\omega), \qquad (36{,}20)$$

где $\gamma(\omega)$ имеет вид

$$\gamma(\omega) = -\frac{1}{kT}\int_{0}^{\infty} e^{-i\omega u}\langle A(0)\,\dot{B}(u)\rangle\,du. \qquad (36{,}21)$$

Формула (36,20) определяет обобщенный коэффициент переноса, связывающий фурье-компоненты обобщенной «силы» $F$ и вызываемые ею изменения величины $B$.

Естественно назвать $I(\omega)$ обобщенным потоком, отвечающим «силе» $F(\omega)$. Средний поток $\langle I(\omega)\rangle$ оказывается связанным с «силой» $F(\omega)$ соотношением, которое является обобщением хорошо известных из электродинамики эмпирических соотношений — закона Ома, диэлектрической и магнитной восприимчивости и т. п.

В § 39 мы убедимся в полной тождественности этих выражений.

Формула (36,21) допускает непосредственное обобщение на случай векторных сил или нескольких сил, действующих на систему. Можно при этом сразу написать вместо (36,21) равенство

$$\langle I_k(\omega)\rangle = \gamma_{ik}(\omega) F_i(\omega),$$

где $i$, $k$ пробегает соответствующий ряд значений (например, $x$, $y$, $z$ или $k = 1, 2, 3, \ldots$). Тензор $\gamma_{ik}$ называется тензором коэффициентов переноса

$$\gamma_{ik}(\omega) = -\frac{1}{kT}\int\limits_0^\infty e^{-i\omega u}\langle A_i(0)\dot{B}_k(u)\rangle\, du.$$

## § 37. Реакция системы на внешнее динамическое возмущение. Квантовый расчет

Рассмотрим теперь реакцию системы на внешнее динамическое возмущение с помощью квантового уравнения для матрицы плотности (2,3).

Пусть некоторая квантовомеханическая система, описываемая матрицей плотности $\hat{\rho}$, находится в термостате и подвергается действию произвольного внешнего поля $U(t)$, зависящего от времени. Мы будем считать внешнее поле достаточно слабым, чтобы его можно было считать малым возмущением. Кроме того, будем считать, что приложенное поле удовлетворяет требованию

$$U(t)\to 0 \quad \text{при} \quad t\to -\infty. \qquad (37,1)$$

Напишем прежде всего уравнение для статистического оператора в отсутствие внешнего поля:

$$i\hbar\frac{\partial\hat{\rho}}{\partial t} + [\hat{\rho}\hat{H}] = 0. \qquad (37,2)$$

Уравнение для статистического оператора при наложении внешнего поля $U(t)$ будет иметь вид

$$i\hbar\frac{\partial\hat{\rho}}{\partial t} + [\hat{\rho},\ \hat{H} + U(t)] = 0. \qquad (37,3)$$

От уравнения (37,3) удобно перейти к интегральному уравнению. Для этого будем считать член $[\hat{\rho}, U]$ известной величиной. Тогда формально (37,3) будет представлять линейное неоднородное уравнение первого порядка относительно функции $\hat{\rho}$.

Если дополнить это уравнение начальным условием:

$$\hat{\rho}(t \to -\infty) \to \hat{\rho}_0, \tag{37,4}$$

то решение можно сразу написать в виде

$$\hat{\rho} = \hat{\rho}_0 + \frac{i}{\hbar} \int\limits_{-\infty}^{t} e^{-\frac{iH(t-x)}{\hbar}} [\hat{\rho}(x), U(x)] e^{\frac{iH\cdot(t-x)}{\hbar}} dx. \tag{37,5}$$

Непосредственной постановкой можно убедиться, что (37,5) удовлетворяет уравнению (37,3) и начальному условию (37,4).

Интегральное уравнение (37,5) содержит малое возмущение и может решаться итерациями (последовательными приближениями).

Полагая

$$\hat{\rho} = \hat{\rho}_0 + \hat{\rho}' + \hat{\rho}'' + \ldots, \tag{37,6}$$

имеем

$$\hat{\rho}'(t) = \frac{i}{\hbar} \int\limits_{-\infty}^{t} e^{-\frac{iH\cdot(t-x)}{\hbar}} [\hat{\rho}_0, U(x)] e^{\frac{iH\cdot(t-x)}{\hbar}} dx =$$

$$= \frac{i}{\hbar} \int\limits_{0}^{\infty} e^{-\frac{iHt'}{\hbar}} [\hat{\rho}_0, U(t-t')] e^{\frac{iHt'}{\hbar}} dt', \tag{37,7}$$

где было положено $t' = t - x$.

Последующие поправки $\hat{\rho}''$, $\hat{\rho}'''$, ... могут быть получены аналогичным образом.

Формула (37,7) дает ответ на поставленную задачу в первом приближении. Она представляет квантовое обобщение классической формулы (36,6). Изменение среднего значения любой величины, описываемой оператором $\hat{B}$, согласно (1,8) имеет вид

$$\langle \Delta\hat{B} \rangle = \mathrm{Sp}(\hat{\rho}, \hat{B}) - \mathrm{Sp}(\hat{\rho}_0, \hat{B}) =$$

$$= \frac{i}{\hbar} \int\limits_{0}^{\infty} e^{-i/\hbar Ht'} \mathrm{Sp}[\hat{\rho}_0, U(t-t')] e^{i/\hbar Ht'} dt'. \tag{37,8}$$

Формула (37,8) представляет общее выражение для отклика системы на малое динамическое возмущение. Она является при-

ближенной в том смысле, что учитывается лишь возмущение первого порядка малости.

Однако в остальном она применима к совершенно произвольным системам при любом взаимодействии между образующими ее частицами.

В отличие от кинетического уравнения, формула (37,8) дает амплитуду вероятности, т. е. содержит как диагональные, так и недиагональные матричные элементы матрицы плотности.

## § 38. Реакция системы на термическое возмущение

Более сложным является вопрос о реакции системы на термическое возмущение, которое не имеет характера внешнего поля, действующего на систему. Поскольку действие термического возмущения нельзя представить в виде дополнительного члена в функции Гамильтона отдельной частицы, предыдущие расчеты к этому случаю неприменимы. Оказывается, однако, что при известных ограничениях для термических возмущений можно получить закон линейной реакции типа (36,6).

Рассмотрим некоторую макроскопическую систему, находящуюся в неравновесном состоянии. Будем характеризовать состояние этой системы совокупностью макроскопических параметров $x_i$. Значение этих параметров будем отсчитывать от их равновесных значений, приняв последние за нуль.

В неравновесной системе значения параметров $x_i$ будут изменяться во времени, так что $\dot{x}_i \neq 0$. Мы ограничимся такими неравновесными системами, которые находятся в состояниях, достаточно близких к равновесным. Это значит, что параметры $x_i$ можно считать малыми величинами.

Введем в рассмотрение шкалу времен

$$\tau_{\text{micro}} \ll \tau \ll \tau_{\text{macro}}.$$

Здесь $\tau_{\text{micro}}$ — времена микроскопического масштаба, характеризующие изменение состояния микроскопических частей системы, $\tau_{\text{macro}}$ — времена макроскопического масштаба, за которые в системе устанавливается состояние полного статистического равновесия.

В основу дальнейшего будет положена гипотеза о существовании в системе локального статистического равновесия, которое устанавливается за промежуточное время порядка $\tau$.

Система, находящаяся в состоянии локального статистического равновесия, описывается функцией распределения $\rho^{\text{loc}}$, имеющий вид локального распределения Гиббса:

$$\rho^{\text{loc}} = \frac{1}{Z} e^{-\frac{E(p,\, q) + \Lambda_i x_i}{kT}}\, d\Gamma, \qquad (38,1)$$

Параметры $x_i$, являющиеся функциями времени, изменяются за времена порядка $t \sim \tau_{macro}$ и при $t \approx \tau_{macro}$ обращаются в нуль. При этом при

$$\rho^{loc} \to \rho^{eq},$$

где $\rho^{eq}$ — равновесное распределение Гиббса.

Поскольку $x_i$ малы, в локально-равновесном распределении Гиббса они берутся при значении $t \neq 0$.

Средние значения параметров $\bar{x}_i$ могут быть вычислены по обычным формулам

$$\bar{x}_i = \frac{1}{Z} \int x_i e^{-\frac{E(p,\, q)+\Lambda_i x_i}{kT}} d\Gamma = -kT \frac{\partial \ln Z}{\partial \Lambda_i}. \qquad (38,2)$$

Локальное распределение Гиббса не может быть выведено из каких-либо общих положений теории. Его следует рассматривать как некоторую гипотезу. Справедливость этой гипотезы подтверждается многочисленными опытными фактами. Неудовлетворенность, которая возникает при такой постановке вопроса, может быть, будет несколько ослаблена напоминанием того факта, что и равновесное распределение Гиббса также является до известной степени гипотезой, хотя и весьма обоснованной и подкрепленной многочисленными убедительными соображениями.

Параметры $\Lambda_i$, сопряженные $x_i$, также изменяются за времена $t \sim \tau_{macro}$.

Локально-равновесное распределение Гиббса позволяет определить среднюю энергию и энтропию системы (ср. § 21 и 24 ч. III)

$$E(\bar{x}_i) = kT^2 \frac{\partial \ln Z}{\partial T}, \qquad (38,3)$$

$$S(\bar{x}_i) = \frac{E}{kT} + \ln Z - \frac{\Lambda_i x_i}{kT}. \qquad (38,4)$$

Энтропия является функцией параметров $x_i$. В состоянии равновесия, когда $x_i = 0$, т. е. за времена порядка $\tau_{macro}$, энтропия достигает максимального значения,

$$S(0) = \frac{E}{kT} + \ln Z. \qquad (38,5)$$

Формула (38,4) позволяет выразить параметры $\Lambda_i$ через $S(\bar{x}_i)$. Удобно вместо $\Lambda_i$ ввести величины

$$X_i = \frac{\Lambda_i}{kT}. \qquad (38,6)$$

Таким образом

$$S(\bar{x}_i) = \frac{E}{kT} + \ln Z - X_i x_i. \qquad (38,7)$$

Параметры $X_i$, а также средние значения $\bar{x}_i$, мы будем считать изменяющимися за времена $t \sim \tau_{\text{macro}}$. Состоянию статистического равновесия отвечают значения $X_i = 0$.

Распределение Гиббса, средняя энергия и энтропия системы изменяются во времени. Однако, как видно из определения (38,3), характерное время изменения этих величин порядка $\tau_{\text{macro}}$.

Формула (38,7) позволяет выразить параметры $X_i$ через $S$:

$$X_i = -k\frac{\partial S}{\partial x_i}. \tag{38,8}$$

Приняв локальное распределение Гиббса, характеризующее состояние системы при $t = 0$, можно проследить за ее эволюцией во времени. При этом мы ограничимся временами $t \ll \tau_{\text{macro}}$.

Эволюцию системы можно характеризовать величиной

$$I_i(t) = \dot{\bar{x}}_i, \tag{38,9}$$

представляющей среднюю скорость изменения параметра $x_i$. Пользуясь (38,1), находим

$$I_i \cong \int \dot{x}_i(t)\rho^{\text{loc}}(0)\,d\Gamma = \frac{1}{Z}\int \dot{x}_i(t)\,e^{-\frac{E(p,\,q)+\Lambda_k(0)x_k}{kT}}\,d\Gamma.$$

Поскольку параметры $x_i$ считаются малыми, можно в первом приближении написать

$$I_i = \frac{1}{Z}\int \dot{x}_i(t)\,e^{-\frac{E(p,\,q)}{kT}}\,d\Gamma - \sum \Lambda_k(0)\frac{1}{kTZ}\int \dot{x}_i(t)\,x_k(0)\,e^{-\frac{E(p,\,q)}{kT}}\,d\Gamma =$$
$$= \langle \dot{x}_i(t)\rangle - \frac{1}{kT}\sum \Lambda_k(0)\langle x_k(0)\dot{x}_k(t)\rangle = \langle \dot{x}_i(t)\rangle - \sum X_k(0)\langle x_k(0)\dot{x}_i(t)\rangle.$$

В состоянии равновесия, очевидно

$$\langle \dot{x}_i(t)\rangle = 0.$$

Преобразуем далее среднее значение:

$$\langle x_k(0)\dot{x}_i(t)\rangle = \langle x_k(-t)\dot{x}_i(0)\rangle =$$
$$= \left\langle x_k(0) - \int_{-t}^{0}\dot{x}_k(\alpha)\,d\alpha,\ \dot{x}_i(0)\right\rangle = \langle x_k(0)\dot{x}_i(0)\rangle - \int_{-t}^{0}\langle \dot{x}_i(0)\,\dot{x}_k(\alpha)\rangle\,d\alpha.$$

В начальный момент времени значения параметров $x_i(0)$ и скоростей их изменения $\dot{x}_i(0)$ независимы друг от друга. Поэтому их корреляция обращается в нуль:

$$\langle x_k(0)\dot{x}_i(0)\rangle = 0.$$

Следовательно

$$\langle \dot{x}_i(0)\,\dot{x}_k(t)\rangle = -\int_{-t}^{0} \langle \dot{x}_i(0)\,\dot{x}_k(\alpha)\rangle\,d\alpha = +\int_{0}^{t} \langle \dot{x}_i(0)\,\dot{x}_k(\alpha)\rangle\,d\alpha, \tag{38,10}$$

откуда

$$I_i(t) = \sum L_{ik}X_k(0) \simeq \sum L_{ik}X_k(t). \tag{38,11}$$

Замена $X_k(0)$ на $X_k(t)$ возможна потому, что термодинамические силы изменяются за время $\sim\tau_{\text{macro}}$, тогда как в формуле (38,11) время $t$ ограничено неравенством

$$t \ll \tau_{\text{macro}}.$$

Через $L_{ik}$ обозначены величины

$$L_{ik} = L_{ki} = \int_0^t \langle \dot{x}_i(0)\,\dot{x}_k(\alpha)\rangle\,d\alpha. \tag{38,12}$$

Мы видим, что отклик реакции на термодинамическое возмущение выражается линейным законом. Термодинамические силы $X_k$ и вызывают термодинамические потоки $I_i$. Коэффициенты $L_{ik}$ являются, таким образом, кинетическими коэффициентами. Возникающие потоки характеризуются совокупностью симметричных кинетических коэффициентов $L_{ik}$.

Последние определяются коррелятивными функциями, взятыми по равновесному состоянию системы. Эта связь имеет совершенно общий характер и в этом смысле временны́е коррелятивные функции являются основными характеристиками кинетических процессов в неравновесных системах.

В виде примера рассмотрим коэффициент диффузии. По определению,

$$D = \lim_{\Delta t\to 0} \frac{\overline{(\Delta R)^2}}{6\,\Delta t}. \tag{38,13}$$

Представим смещение $\Delta\boldsymbol{R}$ в виде

$$\Delta\boldsymbol{R} = \int_0^{\Delta t} \boldsymbol{v}\,dt.$$

Тогда

$$D = \lim_{\Delta t\to 0} \frac{1}{6\,\Delta t}\int_0^{\Delta t} dt'' \int_0^{\Delta t} dt'\,\overline{\boldsymbol{v}(t')\,\boldsymbol{v}(t'')}. \tag{38,14}$$

Среднее значение от скоростей не зависит от начала отсчета времени. Поэтому можно написать

$$\overline{\boldsymbol{v}(t')\,\boldsymbol{v}(t'')} = \overline{\boldsymbol{v}(0)\,\boldsymbol{v}(t'-t'')}. \tag{38,15}$$

Подставляя (38,15) в (38,14), и выполняя одно интегрирование непосредственно, находим

$$D = \lim_{\Delta t \to 0} \frac{1}{3} \int_0^{\Delta t} \left(1 - \frac{t''}{\Delta t}\right) \overline{(\boldsymbol{v}(0)\,\boldsymbol{v}(t''))}\,dt''. \qquad (38,16)$$

Если интервал $\Delta t$ макроскопически мал, но все же велик по сравнению с характерными временами молекулярных процессов, то (38,16) можно представить в виде

$$D \simeq \lim_{\Delta t \to 0} \frac{1}{3} \int_0^{\Delta t} dt'' \langle \boldsymbol{v}(0)\,\boldsymbol{v}(t'')\rangle. \qquad (38,17)$$

## § 39. Вычисление кинетических коэффициентов и связь с уравнением Больцмана

Общее выражение для отклика системы на динамическое возмущение, найденное в предыдущем параграфе, позволяет в принципе находить любые кинетические коэффициенты при малых возмущениях системы. Мы в виде примера ограничимся расчетом действия электрического поля, т. е. расчетом электропроводности [1]).

При этом мы рассмотрим квазигазовую систему — совокупность заряженных частиц, не взаимодействующих между собой (частицы первого сорта) и частиц второго сорта, состояние которых не изменяется под действием электрического поля. Например, частицы второго сорта могут быть нейтральными или заряженными, но слишком тяжелыми, чтобы их состояние возмущалось слабым полем. Они могут быть заряженными и образовывать кристаллическую решетку, на состояние которой также не влияет слабое поле и т. п.

Подобные системы мы уже рассматривали выше с помощью уравнения Больцмана (см., например § 28). Однако и это следует особо подчеркнуть, сейчас мы не предполагаем взаимодействие между частицами первого и второго сорта слабым. Наоборот, оно может быть как угодно сильным и описываться любым законом. Оператор Гамильтона, входящий в формулы предыдущего параграфа, включает в себя это взаимодействие. Совокупность всех частиц первого и второго сорта образует макроскопическую подсистему, которая, как целое, испытывает слабое взаимодействие с окружающим ее термостатом.

---

[1]) См. M. L a x, Phys. Rev. **109**, p. 1921 (1958).

Будем считать, что на подсистему действует однородное электрическое поле

$$\boldsymbol{E} = \lim_{\alpha\to 0} \boldsymbol{E}_0 e^{i\omega t} e^{\alpha t}.$$

Тогда слагаемое $U$ в полном гамильтониане приобретает вид

$$U(t) = -\lim_{\alpha\to 0} e\boldsymbol{E}_0 \boldsymbol{r} e^{i\omega t} e^{\alpha t}. \qquad (39,1)$$

Подставляя (39,1) в (37,7), получаем

$$\hat{\rho}'(t) = -\frac{i}{\hbar} e\boldsymbol{E}_0 \int_0^\infty e^{\alpha t} e^{-i\hat{H}t'/\hbar} [\hat{\rho}_0, \boldsymbol{r}] e^{i\hat{H}t'/\hbar} e^{-\alpha(t-t')} e^{i\omega(t-t')}\, dt'.$$

Переходя к пределу $\alpha \to 0$, имеем

$$\hat{\rho}'(t) = -\frac{i}{\hbar} e\boldsymbol{E}_0 e^{i\omega t} \int_0^\infty e^{-i\hat{H}t'/\hbar} [\hat{\rho}_0, \boldsymbol{r}] e^{i\hat{H}t'/\hbar} e^{-i\omega t'}\, dt'. \qquad (39,2)$$

Пользуясь операторами в импульсном представлении, имеем

$$[\hat{\rho}_0, \hat{\boldsymbol{r}}] = \hat{\rho}_0 \hat{\boldsymbol{r}} - \hat{\boldsymbol{r}} \hat{\rho}_0 = i\hbar \left( \hat{\rho}_0 \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{p}} - \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{p}} \hat{\rho}_0 \right) = -i\hbar \frac{\partial \hat{\rho}_0}{\partial \boldsymbol{p}}, \qquad (39,3)$$

откуда

$$\hat{\rho}'(t) = -e\boldsymbol{E}_0 e^{i\omega t} \int_0^\infty e^{-i\hat{H}t'/\hbar} \frac{\partial \hat{\rho}_0}{\partial \boldsymbol{p}} e^{i\hat{H}t'/\hbar} e^{-i\omega t'}\, dt'. \qquad (39,4)$$

Электрический ток можно записать в виде

$$j = ne \operatorname{Sp} (\hat{\boldsymbol{v}} \hat{\rho}'). \qquad (39,5)$$

Значение шпура не зависит от выбора представления. Выберем такое представление, в котором оператор скорости является диагональным. Тогда выражение для тока можно написать в виде

$$j = ne \int \boldsymbol{v} \langle \boldsymbol{v} | \hat{\rho}' | \boldsymbol{v} \rangle\, d\boldsymbol{v}, \qquad (39,6)$$

где матрица $\langle \boldsymbol{v} | \hat{\rho}' | \boldsymbol{v} \rangle$ дается формулой

$$\langle \boldsymbol{v} | \hat{\rho}' | \boldsymbol{v} \rangle = -\frac{e}{m} \boldsymbol{E}_0 e^{i\omega t} \cdot \langle \boldsymbol{v} | \int_0^\infty e^{-i\omega t'} e^{-i\hat{H}t'/\hbar} \frac{\partial \hat{\rho}_0}{\partial \boldsymbol{v}} e^{i\hat{H}t'/\hbar}\, dt' | \boldsymbol{v} \rangle =$$

$$= -\frac{e\boldsymbol{E}_0 e^{i\omega t}}{m} \int\int\int_0^\infty e^{-i\omega t'} \langle \boldsymbol{v} | e^{-i\hat{H}t'/\hbar} | \boldsymbol{v}' \rangle \langle \boldsymbol{v}' | \frac{\partial \hat{\rho}_0}{\partial \boldsymbol{v}} | \boldsymbol{v}'' \rangle \times$$

$$\times \langle \boldsymbol{v}'' | e^{i\hat{H}t'/\hbar} | \boldsymbol{v} \rangle\, dt'\, d\boldsymbol{v}'\, d\boldsymbol{v}''. \qquad (39,7)$$

Таким образом, электропроводность имеет вид

$$\sigma = -\frac{ne^2}{m}\int_0^\infty e^{-i\omega t'}\,dt'\int v\,dv\int dv'\int dv''\times$$
$$\times\langle v\,|e^{-i\hat{H}t'/\hbar}|\,v'\rangle\langle v'\,|\frac{\partial\hat{\rho}_0}{\partial v}|\,v''\rangle\langle v''\,|e^{-i\hat{H}t'/\hbar}|\,v\rangle. \qquad (39,8)$$

Полученное выражение имеет столь же общий характер, как и формула (39,2) для изменения матрицы плотности. Оно содержит как диагональные ($v' = v''$), так и недиагональные матричные элементы ($v' \neq v''$) равновесной матрицы плотности $\hat{\rho}_0$. Поэтому формула (39,8) обладает широкой областью применимости.

Так, например, эта формула определяет электропроводность жидкого металла или проводника весьма сильно легированного примесями, когда приближение уравнения Больцмана недостаточно.

Весьма важно сравнить теорию реакции на внешнее динамическое возмущение, основанную на точном уравнении для матрицы плотности с кинетическим уравнением Больцмана.

Для этого проще всего сравнить найденный нами кинетический коэффициент — электропроводность (39,8) с аналогичным выражением, полученным при помощи уравнения Больцмана.

Для этого сделаем дальнейшее ограничение общности формулы (39,8). Именно, предположим, что взаимодействие заряженных частиц (частиц первого сорта) с частицами второго сорта является слабым.

Это значит, что в первом приближении систему заряженных частиц можно считать идеальным газом.

Матрица плотности $\hat{\rho}_0$ может быть при этом применена к отдельной частице, если положить

$$\hat{\rho}_0 = \frac{e^{-\hat{H}_0/kT}}{Z} = \frac{\prod\limits_i e^{-\frac{m\vartheta_i^2}{2kT}}}{\prod Z_i}, \qquad (39,9)$$

где в $\hat{H}_0$ не включено взаимодействие данной частицы со всеми остальными частицами первого и второго сорта.

При этом в $v$-представлении, в котором записано выражение (39,9), матрица плотности $\hat{\rho}_0$ диагональна. Поэтому

$$\langle v'\,|\frac{\partial\hat{\rho}_0'}{\partial v}|\,v''\rangle = \frac{\partial\hat{\rho}_0(v'')}{\partial v''}\,\delta(v'-v'') \qquad (39,10)$$

и соответственно

$$\sigma = -\frac{ne^2}{m}\int_0^\infty e^{-i\omega t'}dt'\int v\,dv\int dv' \times$$
$$\times \int \langle v\,|e^{-i\hat{H}_0 t'/\hbar}|\,v'\rangle \langle v'\,|\frac{\partial\hat{\rho}_0}{\partial v'}|\,v''\rangle \langle v''\,|e^{i\hat{H}_0 t'/\hbar}|\,v\rangle\, dv'' =$$
$$= -\frac{ne^2}{m}\int_0^\infty e^{-i\omega t}dt'\int v\,dv\int \langle v\,|e^{-i\hat{H}_0 t'/\hbar}|\,v'\rangle \times$$
$$\times \frac{\partial\hat{\rho}_0(v'')}{\partial v''}\delta(v'-v'')\langle v''\,|e^{i\hat{H}_0 t'/\hbar}|\,v\rangle\, dv'\, dv'' =$$
$$= -\frac{ne^2}{m}\int_0^\infty e^{-i\omega t'}dt'\int v\,dv\int W(v,\,v',\,t')\frac{\partial\hat{\rho}_0(v')}{\partial v}dv', \qquad (39{,}11)$$

где обозначено

$$W(v,\,v',\,t') = \left|\left\langle v\left|e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t'}\right|v'\right\rangle\right|^2. \qquad (39{,}12)$$

Очевидно, что $W(v, v', t)$ представляет вероятность того, что частица, имевшая в момент времени $t = 0$ скорость $v$, за время $t$ приобретает скорость $v'$. Сравним полученное выражение с общим решением уравнения Больцмана (28,7) во внешнем поле сил.

Это сравнение позволяет убедиться в их полной тождественности, если только заменить $\hat{\rho}_0$ на $f_0$. По своему смыслу матрица плотности свободной частицы $\hat{\rho}_0$ действительно совпадает с одночастичной функцией распределения.

Мы видим, таким образом, что уравнение Больцмана для однородных квазигазовых систем действительно следует из точного уравнения для матрицы плотности.

Приведенные выше рассуждения допускают обобщение на системы взаимодействующих между собой частиц. Однако на этом мы не можем здесь останавливаться [1]).

## § 40. Теория Онзагера

При малых отклонениях от состояния равновесия можно получить описание неравновесных процессов в замкнутой системе, исходя из весьма общих соображений, впервые высказанных Онзагером. Будем характеризовать состояние замкнутой систе-

---

[1]) См. сборник «Вопросы квантовой теории необратимых процессов», ИЛ, 1961 (в особенности статью М. Лэкса) и «Термодинамика необратимых процессов», ИЛ, 1962.

мы некоторыми макроскопическими параметрами $x_i$. Эти параметры являются функциями времени.

При малых отклонениях от состояния равновесия параметры, характеризующие ее состояние, можно считать имеющими термодинамический смысл. Иными словами, под $x_i$ следует понимать разность между значениями термодинамических величин в данном неравновесном состоянии и в состоянии равновесия. Напомним, что в состоянии равновесия все термодинамические величины имеют значения, равные своим средним.

Совершенно ясно, что при больших отклонениях от состояния равновесия термодинамические понятия теряют смысл. Однако, как мы видели выше, при малых отклонениях от равновесия можно пользоваться термодинамическими величинами, которые при этом не равны своим средним значениям. Для этого необходимо лишь, чтобы существовало неполное локальное равновесие в каждой точке тела. При малых значениях $x_i$ все величины, характеризующие состояние системы и скорость его изменения, могут быть разложены в ряд по степеням $x_i$. В этих рядах следует удержать лишь первые члены, так что можно записать

$$\dot{x}_i = \alpha_{ik} x_k, \tag{40,1}$$

$$S = S_0 - \beta_{ik} \frac{x_i x_k}{2}, \tag{40,2}$$

$$\dot{S} = -\beta_{ik} \dot{x}_i x_k. \tag{40,3}$$

Формула (40,1) показывает, что все процессы вблизи состояния равновесия являются медленными. Энтропия системы в неравновесном состоянии выражается квадратичной формой, причем из условия (40,2) следует, что

$$\beta_{ik} = \beta_{ki}.$$

Возникновение энтропии $\dot{S}$ в единицу времени также мало́. Очевидно, что все приведенные формулы могут применяться к изменениям состояния системы за ограниченные времена $t$. Именно, с одной стороны, эти времена должны быть весьма велики по сравнению с микроскопическими временами, $\tau_{\text{micro}}$, для того, чтобы можно было говорить о изменении макроскопических величин. С другой стороны, система должна находиться в неравновесном состоянии. Если полное равновесие устанавливается в ней за время релаксации $\tau_{\text{micro}}$, то должно выполняться неравенство

$$\tau_{\text{micro}} \ll t \ll \tau_{\text{macro}}.$$

Обозначим через $I'_i$ поток

$$I'_i = \dot{x}_i$$

и через $X'_i$ так называемую термодинамическую силу

$$X'_i = -\frac{\partial S}{\partial x_i} = -\beta_{ik}x_k.$$

Тогда предыдущие соотношения можно представить в виде

$$I'_i = \alpha_{ik}x_k = -\alpha_{ij}\beta^{-1}_{jk}X'_k = \gamma_{ik}X'_k, \tag{40,1'}$$

$$S = S_0 + \frac{1}{2}X'_i x_i, \tag{40,2'}$$

$$\dot{S} = I'_i X'_i. \tag{40,3'}$$

В основу дальнейшего рассмотрения будет положена следующая гипотеза Онзагера: макроскопическое неравновесное состояние вблизи равновесия можно рассматривать как некоторую флуктуацию. Изменение во времени состояний макроскопической неравновесной системы и микроскопической системы, испытавшей флуктуацию, происходят по одинаковым законам. Пусть, например, в макроскопической системе создано неравномерное распределение концентрации и температуры. При этом в системе возникнут потоки, описывающиеся макроскопическими соответствующими законами переноса. Если в равновесной системе происходит флуктуация концентрации или температуры, в результате которых создается такое же распределение концентраций и температур, то согласно гипотезе Онзагера эти флуктуации будут рассасываться по тем же законам, по каким происходит выравнивание концентрации или температур в неравновесной макроскопической системе.

Потоки частиц и температур будут определяться законами диффузии и теплопроводности независимо от того, как возникли соответствующие разности концентраций и температур, в результате самопроизвольной флуктуации в равновесной системе или в результате внешних воздействий, которые перевели систему в неравновесное состояние.

Таким образом, согласно гипотезе Онзагера, соотношение между потоками и силами, т. е. макроскопический закон

$$I_i = \sum L_{ik}X_k, \tag{40,4}$$

в равной мере применим к неравновесным системам и к процессам рассасывания флуктуации. Средние макроскопические потоки и силы $I_i$ и $X_i$ получаются усреднением $I'_i$ и $X'_i$, а коэффициенты $L_{ik}$ и $\gamma_{ik}$ совпадают.

Оказывается, что кинетические коэффициенты $L_{ik}$ могут быть выражены через временну́ю коррелятивную функцию. На основании гипотезы Онзагера можно написать

$$I_i(t) = \overline{\frac{dx_i}{dt}} = L_{ik}X_k(t). \tag{40,5}$$

Умножим (40,5) на $x_l(0)$, так что

$$x_l(0)\,\overline{\dot{x}}_i = x_l(0)\,L_{ik}X_k(t). \tag{40,6}$$

Введем теперь в рассмотрение совокупность (ансамбль) идентичных систем, отличающихся заданными начальными значениями параметров $x_i(0)$. Обозначим среднее по этому ансамблю скобками $\langle\ \rangle$.

Тогда находим

$$\langle x_l(0)\,\overline{\dot{x}}_i(t)\rangle = L_{ik}\,\langle x_l(0)\,X_k(t)\rangle. \tag{40,7}$$

Совокупность равновесных замкнутых систем в начальный момент времени образует гиббсовский ансамбль. Для этого ансамбля можно написать распределение вероятностей в виде

$$w(x_1,\ \ldots,\ x_l\ \ldots)\,dx_1\ \ldots\ dx_N = Ce^{\frac{\Delta S(x_1,\ \ldots,\ x_l\ \ldots)}{k}}\,dx_1\ldots dx_N. \tag{40,8}$$

Тогда средние значения входящих в формулу (40,7) величин можно записать в виде

$$\langle x_l(0)\,\overline{\dot{x}_i(t)}\rangle = C\int x_l(0)\,\overline{\frac{dx_i(t)}{dt}}\,e^{\frac{\Delta S}{k}}\,dx_1\ \ldots\ dx_l\ \ldots\ dx_N$$

и соответственно

$$\langle x_l(0)\,X_k(t)\rangle = C\int x_l(0)\,X_k(t)\,e^{\frac{\Delta S}{k}}\,dx_1\ \ldots\ dx_N. \tag{40,9}$$

Необходимо подчеркнуть, что тем самым проблема определения средних в неравновесной системе, для которой неизвестно распределение вероятностей, благодаря гипотезе Онзагера оказывается сведенной к проблеме вычисления ансамбля средних для гиббсовского ансамбля замкнутых систем с распределением вероятностей, даваемых формулой (40,8).

Пользуясь квазиэргодической гипотезой, можно написать

$$\left\langle x_l(0)\,\overline{\frac{dx_i(t)}{dt}}\right\rangle = \langle x_l(0)\,\dot{x}_i(t)\rangle.$$

Тогда (40,7) запишется в виде

$$\langle x_l(0)\,\dot{x}_i(t)\rangle = L_{ik}\,\langle x_l(0)\,X_k(t)\rangle. \tag{40,10}$$

Левую часть (40,10) преобразуем так же, как это было сделано в предыдущем параграфе [ср. (38,10)]:

$$\langle x_l(0)\,\dot{x}_i(t)\rangle = \langle x_l(-t)\,\dot{x}_i(0)\rangle = \langle x_l(0) + \int_0^t \dot{x}_l(\alpha)\,d\alpha,\ \dot{x}_i(0)\rangle =$$

$$= \langle x_l(0)\,\dot{x}_i(0)\rangle + \left\langle\int_0^t \dot{x}_l(\alpha)\,\dot{x}_i(0)\,d(\alpha)\right\rangle = \left\langle\int_0^t \dot{x}_i(0)\dot{x}_l(\alpha)\,d\alpha\right\rangle. \tag{40,11}$$

Правую часть можно преобразовать следующим образом: поскольку средняя сила изменяется за времена $t \sim \tau_{\text{macro}}$, тогда как мы рассматриваем эволюцию системы за времена $t \ll \tau_{\text{macro}}$, можно приближенно написать

$$X_k(t) \simeq X_k(0).$$

Нашей задачей является нахождение среднего

$$\langle x_l(0) X_k(0) \rangle = -\left\langle x_l(0) \frac{\partial S}{\partial x_k} \right\rangle. \tag{40,12}$$

Для вычисления среднего мы можем на основании гипотезы Онзагера воспользоваться распределением Гиббса

$$\left\langle x_l(0) \frac{\partial S}{\partial x_k} \right\rangle = C \int x_l(0) \frac{\partial S}{\partial x_k} e^{\frac{\Delta S}{k}} \, dx_1 \ldots dx_N.$$

Интеграл по $x_k$ можно взять по частям

$$k \int x_l \left( \frac{\partial}{\partial x_k} e^{\frac{\Delta S}{k}} \right) dx_k = -k \int \frac{\partial x_l(0)}{\partial x_k} e^{\frac{\Delta S}{k}} \, dx_k = -k\delta_{lk},$$

поскольку подынтегральная функция на пределах быстро стремится к нулю.

Таким образом, окончательно

$$\left\langle x_l(0) \frac{\partial S}{\partial x_k} \right\rangle = -k\delta_{lk}. \tag{40,13}$$

Подставляя (40,12) и (40,13) в (40,7), находим

$$L_{lk} = \left\langle \int_0^t \dot{x}_l(0) \, \dot{x}_k(\alpha) \, d\alpha \right\rangle = L_{kl}.$$

Мы видим, что гипотеза Онзагера приводит к точно такому же выражению для кинетических коэффициентов, что и гипотеза локального распределения Гиббса [ср. (38,12)].

Это доказывает эквивалентность обеих гипотез.

Симметрия кинетических коэффициентов $L_{ik} = L_{ki}$ имеет глубокий смысл. Если в системе изменяются, например, два параметра и возникают два потока, то из свойства симметрии следует

$$I_1 = L_{11} X_1 + L_{12} X_2, \tag{40,14}$$

$$I_2 = L_{22} X_2 + L_{12} X_1. \tag{40,15}$$

Формулы (40,14), (40,15) показывают, что сила $X_1$ дает вклад в поток $I_2$, а сила $X_2$ — такой же вклад в поток $I_1$.

Обобщение на большое число сил и потоков не вызывает затруднений.

В физике известно множество таких перекрестных потоков. В виде примера можно указать термодиффузию и обратный ей эффект возникновения температурного градиента при механическом перемешивании газов с одинаковой температурой. Другие примеры будут даны ниже.

Соотношение симметрии позволяет установить общую связь между такими перекрестными процессами. Использование соотношения симметрии позволило описать множество связанных эффектов. Согласие теории с опытными данными следует считать убедительным доказательством гипотезы Онзагера.

## § 41. Следствия из соотношений Онзагера

Заметим прежде всего, что принцип Онзагера может быть получен из гипотезы Онзагера на основе общей теории флуктуаций. Ввиду важности этого принципа мы приведем и этот более обычный вывод.

Согласно принципу микроскопической обратимости, флуктуации в замкнутой системе обратимы во времени, так что для корреляционной функции можно написать

$$\langle x_l(t)\,x_k(t+\tau)\rangle = \langle x_l(t)\,x_k(t-\tau)\rangle.$$

С другой стороны, изменяя начало отсчета времени в правой части, можно написать

$$\langle x_l(t)\,x_k(t+\tau)\rangle = \langle x_l(t+\tau)\,x_k(t)\rangle.$$

Здесь символ $\langle\ \rangle$ означает усреднение по ансамблю. Усредняя еще раз по времени $\tau$, имеем

$$\overline{\langle x_l(t)\,x_k(t+\tau)\rangle}^{\tau} = \overline{\langle x_l(t+\tau)\,x_k(t)\rangle}^{\tau}.$$

Поскольку оба усреднения независимы и равноправны, вычитая из этого равенства $\langle x_l(t)\,\overline{x_k(t)}\rangle$, имеем

$$\langle x_l(t),\ \overline{x_k(t+\tau)} - \overline{x_k(t)}\rangle = \langle x_k(t),\ \overline{x_l(t+\tau)} - \overline{x_l(t)}\rangle.$$

Разделив на $\tau$ и переходя к пределу $\tau \to 0$, имеем

$$\langle x_l(t)\,\overline{\dot{x}_k(t)}\rangle = \langle x_k(t)\,\overline{\dot{x}_l(t)}\rangle.$$

На основании гипотезы Онзагера для флуктуации, так же как и для макроскопических процессов, имеет место соотношение (40,5). Его подстановка в последнее равенство дает

$$\langle x_l,\ L_{ki}X_i\rangle = \langle x_k,\ L_{li}X_i\rangle.$$

Но согласно (40,13) имеем $\langle x_l X_i\rangle = \delta_{li}$, $\langle x_k X_i\rangle = \delta_{ki}$, так что предыдущее равенство сводится к

$$L_{ki}\delta_{li} = L_{li}\delta_{ki},$$

откуда

$$L_{kl} = L_{lk}.$$

В этом выводе доказательства принципа симметрии кинетических коэффициентов использованы только принцип микроскопической обратимости и гипотеза Онзагера [формулы (40,5) и (40,13)]. Однако смысл коэффициентов при этом остается не раскрытым. При выводе принципа Онзагера мы фактически предполагали, что система не находится в магнитном поле и не вращается. Действительно, если система находится в магнитном поле, то при изменении знака времени $\tau \to -\tau$ имеет место равенство

$$\boldsymbol{H} \to -\boldsymbol{H}.$$

Для выполнения принципа микроскопической обратимости сила Лоренца не должна изменять свой знак. Поэтому при обращении времени в магнитном поле имеет место равенство

$$\dot{x}(\tau) \to \dot{x}(-\tau).$$

Точно то же самое относится к угловой скорости вращающегося тела. Повторяя предыдущие выкладки, можно без труда получить, что принцип Онзагера гласит

$$L_{lk}(\boldsymbol{H}) = L_{kl}(-\boldsymbol{H}).$$

Последнее равенство имеет место всегда, если два параметра, $x_k$ и $x_l$, таковы, что при обращении знака времени один из них изменяет свой знак, а другой не изменяет.

Теперь мы разберем некоторые следствия, вытекающие из симметрии кинетических коэффициентов. Анализ этих следствий составляет основное содержание термодинамики необратимых процессов. Мы покажем, что из соотношений Онзагера можно получить как выводы совершенно общего характера, так и результаты более практического свойства. Последние заключаются главным образом в установлении связей между различными неравновесными процессами.

Мы начнем с некоторых общих следствий. К ним прежде всего следует отнести так называемый принцип минимального возникновения энтропии.

Рассмотрим стационарные неравновесные процессы в некоторой замкнутой системе. При стационарных процессах все функции состояния системы не зависят от времени явно. Оказывается, что при стационарных процессах производство энтропии имеет минимальное значение. Чтобы не усложнять формул при доказательстве этого утверждения, мы ограничимся случаем двух перекрестных процессов. Производство энтропии в теле

можно записать в виде

$$P = \int \dot{S}\,dV = \int I_k X_k\,dV = \int \sum L_{ik} X_i X_k\,dV =$$
$$= \int \left\{L_{11}X_1^2 + L_{12}X_1X_2 + L_{21}X_1X_2 + L_{22}X_2^2\right\} dV =$$
$$= \int \left\{L_{11}X_1^2 + 2L_{12}X_1X_2 + L_{22}X_2^2\right\} dV. \qquad (41,1)$$

Варьируемыми величинами являются силы $X_1 = \nabla \frac{1}{T}$ и $X_2 = \nabla \frac{\mu}{T}$, обращающиеся в нуль в состоянии равновесия.

$$P = \int \left\{L_{11}\left(\nabla \frac{1}{T}\right)^2 - 2L_{12}\left(\nabla \frac{1}{T}\right)\nabla\left(\frac{\mu}{T}\right) + L_{22}\left(\nabla \frac{\mu}{T}\right)^2\right\} dV.$$

Условие минимума производства энтропии гласит:

$$\delta P = \delta \int \dot{S}\,dV = 0. \qquad (41,2)$$

Вычисление вариации дает

$$\left[L_{11}\Delta\left(\frac{1}{T}\right) - L_{12}\Delta\frac{\mu}{T}\right]\delta\left(\frac{1}{T}\right) = 0,$$
$$\left[L_{12}\Delta\frac{1}{T} - L_{22}\Delta\left(\frac{\mu}{T}\right)\right]\delta\left(\frac{\mu}{T}\right) = 0$$

или

$$\operatorname{div}\left\{L_{11}\operatorname{grad}\frac{1}{T} - L_{12}\operatorname{grad}\left(\frac{\mu}{T}\right)\right\} = 0, \qquad (41,3)$$
$$\operatorname{div}\left\{L_{12}\operatorname{grad}\frac{1}{T} - L_{22}\operatorname{grad}\left(\frac{\mu}{T}\right)\right\} = 0. \qquad (41,4)$$

Формулы (41,3) и (41,4) выражают условия стационарности.

Таким образом, в стационарном состоянии производство энтропии имеет минимальное значение.

Подчеркнем, что знаки в условиях симметрии существенны. Поэтому приведенное доказательство не имеет места в магнитном поле.

Из других общих следствий теории Онзагера укажем на доказательство существования диссипативной функции для механических систем, совершающих медленное движение. К уравнению движения следует добавить слагаемые силы $X_k$, которые при малых скоростях можно разложить в ряд и ограничиться первым членом разложения

$$X_k = \beta_{lk}\dot{q}_l. \qquad (41,5)$$

Согласно (40,2) тензор $\beta_{lk}$ является симметричным:

$$\beta_{lk} = \beta_{kl}.$$

Нулевой член в разложении отсутствует, поскольку в состоянии покоя на систему не действуют диссипативные силы.

Таким образом, обобщенное уравнение движения имеет вид

$$\dot{p}_k = -\frac{\partial U}{\partial q_k} - \beta_{kl}\dot{q}_l.$$

В силу симметрии $\beta_{lk}$ последнее равенство можно представить в виде

$$\dot{p}_k = -\frac{\partial U}{\partial q_k} - \frac{\partial f}{\partial \dot{q}_k}, \tag{41,6}$$

где обозначено

$$f = \frac{1}{2}\beta_{ik}\dot{q}_i\dot{q}_k. \tag{41,7}$$

Квадратичная форма $f$ представляет диссипативную функцию. Обычно в механике существование диссипативной функции не доказывается. Между тем если бы на систему действовало несколько сил трения, без принципа симметрии невозможно было бы ввести диссипативную функцию. Точно так же не существует какого-либо аналога диссипативной функции при движении в магнитном поле: хотя в этом случае сила также пропорциональна скорости, тензор $\beta_{kl}$ является антисимметричным.

## § 42. Неравновесные процессы в однокомпонентной системе

Мы подробно разберем теорию неравновесных процессов в однокомпонентной системе, чтобы пояснить метод нахождения термодинамических сил и потоков и использования соотношений Онзагера. Характер полученных результатов позволит яснее понять достоинства и недостатки термодинамики необратимых процессов. Рассмотрим однокомпонентную замкнутую систему, состоящую из двух подсистем с разными (хотя и близкими) температурами $T_1$ и $T_2$, давлениями $p_1$ и $p_2$, внутренними энергиями $E_1$ и $E_2$ и числами частиц $N_1$ и $N_2$ в единице объема. Допустим, что обмен энергиями и частицами между подсистемами происходит без появления гидродинамических потоков. Для этого, например, обмен должен осуществляться через пористую перегородку. Пусть $\delta E_i$ и $\delta N_i$ — изменения энергии и числа частиц одной из подсистем ($i = 1, 2$). Тогда изменение энтропии

$$\delta S_i = \left(\frac{\partial S}{\partial E}\right)_{N_i}\delta E_i + \left(\frac{\partial S}{\partial N_i}\right)_{E_i}\delta N_i +$$
$$+ \frac{1}{2}\left[\left(\frac{\partial^2 S}{\partial E_i^2}\right)_{N_i}(\delta E_i)^2 + 2\frac{\partial^2 S}{\partial E_i\,\partial N_i}\delta E_i\,\delta N_i + \left(\frac{\partial^2 S}{\partial N_i^2}\right)_{E_i}(\delta N_i)^2\right] + \ldots$$

Полное изменение энтропии замкнутой системы равно

$$\delta S = \delta S_1 + \delta S_2 = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial^2 S}{\partial E^2}\right)(\delta E)^2 + \frac{1}{2}\left(\frac{\partial^2 S}{\partial N^2}\right)(\delta N)^2 + \left(\frac{\partial^2 S}{\partial E\,\partial N}\right)\delta N\,\delta E =$$
$$= \frac{1}{2}\left[\frac{\partial}{\partial E}\left(\frac{1}{T}\right)(\delta E)^2 - \frac{\partial}{\partial N}\left(\frac{\mu}{T}\right)(\delta N)^2 + 2\,\frac{\partial^2 S}{\partial E\,\partial N}\,\delta N\,\delta E\right].$$

Линейные члены выпали благодаря законам сохранения энергии и числа частиц, а также условиям равновесия в нулевом приближении по $\Delta T$ и $\Delta\mu$.

Возникновение энтропии согласно (41,1) равно

$$\delta\dot{S} = \delta\dot{E}\left[\frac{\partial}{\partial N}\left(\frac{1}{T}\right)\delta N + \frac{\partial}{\partial E}\left(\frac{1}{T}\right)\delta E\right] - \delta\dot{N}\left[\frac{\partial}{\partial N}\left(\frac{\mu}{T}\right)\delta N + \frac{\partial}{\partial E}\left(\frac{\mu}{T}\right)\delta E\right] =$$
$$= \delta\dot{E}\,\delta\left(\frac{1}{T}\right) - \delta\dot{N}\,\delta\left(\frac{\mu}{T}\right).$$

С другой стороны, в силу (40,3′) можно написать

$$\delta\dot{S} = I_E X_E + I_N X_N,$$

где $I_E$ и $I_N$ — потоки энергии и частиц, а $X_E$ и $X_N$ — соответствующие термодинамические силы. Поэтому находим

$$I_E = \delta\dot{E}, \qquad X_E = \delta\left(\frac{1}{T}\right) = -\frac{\delta T}{T^2}, \tag{42,1}$$

$$I_N = \delta\dot{N}, \qquad X_N = -\delta\left(\frac{\mu}{T}\right) = -\frac{v\,\delta p}{T} + \frac{h\,\delta T}{T^2}, \tag{42,2}$$

где $v$ и $h$ — объем и энтальпия, отнесенные на одну частицу. Согласно (40,4) и учитывая симметрию кинетических коэффициентов, можно представить поток в виде

$$I_E = L_{11}X_E + L_{12}X_N, \qquad I_N = L_{12}X_E + L_{22}X_N.$$

Подставляя значение сил, находим

$$I_E = \frac{L_{12}h - L_{11}}{T^2}\,\delta T - \frac{L_{12}v}{T}\,\delta p, \tag{42,3}$$

$$I_N = \frac{L_{22}h - L_{12}}{T^2}\,\delta T - \frac{L_{22}v}{T}\,\delta p. \tag{42,4}$$

Здесь $\delta T$ и $\delta p$ означают изменения энергии и давления при переходе от одной подсистемы к другой:

$$\delta T = T_1 - T_2; \qquad \delta p = p_1 - p_2.$$

Очевидно, что все рассмотрение имеет смысл только для малых значений $\delta T$ и $\delta p$. Перенос энергии и частиц приводит к появлению перекрестных эффектов, характеризуемых кинетическим коэффициентом $L_{12}$. Важным случаем процесса является процесс переноса энергии без переноса частиц.

При этом формула (42,4) показывает, что в стационарном состоянии между подсистемами устанавливаются разности давлений и температур, связанные между собой соотношением

$$\delta p = \frac{h - L_{12}/L_{22}}{vT}\,\delta T. \tag{42,5}$$

Формула (42,5) определяет так называемое термомолекулярное давление. В другом важном частном случае, когда разность температур $\delta T = 0$, формула (42,3) показывает, что между подсистемами течет поток энергии

$$I_E = -\frac{L_{12}v}{T}\,\delta p = \frac{L_{12}}{L_{22}}\,I_N = E^* I_N. \tag{42,6}$$

Этот эффект, именуемый термомеханическим, показывает, что вместе с частицами переносится и некоторая энергия $E^*$.

С помощью (42,6) можно написать

$$\delta p = \frac{h - E^*}{vT}\,\delta T. \tag{42,7}$$

Формулы (42,5)—(42,7) по своему характеру идентичны термодинамическим соотношениям. Они устанавливают весьма общие и часто не очевидные связи между процессами и характеризующими измеряемыми величинами — в данном случае $\delta p$, $\delta T$ и $E^*$. Однако значения этих величин должны определяться из опыта или вычисляться по формулам кинетической теории. В частности, значение $E^*$ может быть без труда вычислено для идеального газа. Легко сообразить, что для идеального газа $E^* = h$, так что в этом случае $\delta p = 0$ при $\delta T \neq 0$.

Для систем, у которых значение $E^*$ рассчитать невозможно, оно должно быть определено экспериментально. Опыт полностью подтверждает соотношение (42,5). Заметим еще, что проведенное нами определение сил и потоков является неоднозначным.

Ясно, что выражение $I_N$ может быть разложено на $X_i$ не только так, как это было сделано в формулах (42,3)—(42,5), но и другими способами. Можно без труда показать[1]), что это не повлияет на конечные формулы, в частности, на (42,7).

## § 43. Неравновесные процессы в многокомпонентных системах (диффузия и термодиффузия)

В качестве второго примера рассмотрим явление термодиффузии. В отличие от предыдущего примера, мы должны теперь рассматривать многокомпонентную систему, свойства которой зависят от пространственных координат. Мы ограничимся слу-

[1]) См. С. Де Гроот, «Термодинамика необратимых процессов», М., 1956. В своем изложении термодинамики необратимых процессов мы следуем этой монографии.

чаем химически не реагирующих компонент и для простоты формул будем считать смесь двухкомпонентной и изотропной. Если в системе имеются градиенты температур и концентраций, в ней возникают потоки тепла, диффузии и перекрестный поток — термодиффузия.

Мы рассмотрели в § 25 термодиффузию в случае смеси идеальных газов. Сравнение результатов расчетов с помощью кинетической теории газов и теории необратимых процессов является поучительным.

Воспользуемся определением сил и потоков по формулам (40,14) и (40,15).

Подчеркнем, что, в отличие от первого примера, в системе с непрерывно изменяющимися в пространстве свойствами движение частиц всегда сопровождается появлением потока массы. Полный поток массы должен быть равен нулю в стационарном состоянии системы.

Пусть $I_1$ и $I_2$ — потоки обеих компонент

$$\boldsymbol{I}_1 = L_{11}\boldsymbol{X}_1 + L_{12}\boldsymbol{X}_2 + L_{1E}\boldsymbol{X}_E,$$

$$\boldsymbol{I}_2 = L_{21}\boldsymbol{X}_1 + L_{22}\boldsymbol{X}_2 + L_{2E}\boldsymbol{X}_E,$$

где силы $X_1$, $X_2$ и $X_E$ даются формулами, тождественными с (42,1) — (42,2) для каждой компоненты:

$$\boldsymbol{X}_i = \operatorname{grad}\frac{\mu_i}{T}, \qquad \boldsymbol{X}_E = \operatorname{grad}\frac{1}{T}.$$

Равенство

$$I_1 + I_2 = 0$$

при произвольных значениях сил дает

$$L_{11} = -L_{21}; \qquad L_{12} = -L_{22}; \qquad L_{1E} = -L_{2E}.$$

Поэтому

$$I_1 = -I_2 = -L_{12}\operatorname{grad}\left(\frac{\mu_1-\mu_2}{T}\right) + L_{1E}\operatorname{grad}\frac{1}{T} =$$

$$= -L_{12}\frac{\operatorname{grad}(\mu_1-\mu_2)}{T} + \{L_{1E} - L_{12}(\mu_1-\mu_2)\}\operatorname{grad}\frac{1}{T}.$$

Из основного термодинамического равенства имеем

$$\operatorname{grad}(\mu_1-\mu_2) =$$

$$= \frac{\partial(\mu_1-\mu_2)}{\partial T}\operatorname{grad}T + \frac{\partial(\mu_1-\mu_2)}{\partial p}\operatorname{grad}dp + \frac{\partial(\mu_1-\mu_2)}{\partial c_1}\operatorname{grad}c_1.$$

При наличии механического равновесия $\operatorname{grad}p = 0$.

Воспользовавшись соотношением Гиббса — Дюгема

$$c_1\,d\mu_1 + c_2\,d\mu_2 = 0,$$

находим окончательно

$$\operatorname{grad}(\mu_1-\mu_2) = -(s_1-s_2)\operatorname{grad} T + \frac{1}{c_2}\left(\frac{\partial\mu_1}{\partial c_1}\right)\operatorname{grad} c_1 =$$
$$= (s_1-s_2)T^2\operatorname{grad}\frac{1}{T} + \frac{1}{1-c_1}\left(\frac{\partial\mu_1}{\partial c_1}\right)\operatorname{grad} c_1.$$

При этом для потока находим

$$I_1 = -\frac{L_{12}}{T(1-c_1)}\left(\frac{\partial\mu_1}{\partial c_1}\right)\operatorname{grad} c_1 - \frac{L_{1E}-L_{12}(h_1-h_2)}{T^2}\operatorname{grad} T. \qquad (43{,}1)$$

Если ввести коэффициент диффузии

$$D_{12} = L_{12}\frac{1}{(1-c_1)T}\frac{\partial\mu_1}{\partial c_1} \qquad (43{,}2)$$

и коэффициент термодиффузии

$$D_T = \frac{L_{1E}-L_{12}(h_1-h_2)}{T^2(1-c_1)c_1}, \qquad (43{,}3)$$

то (43,1) дает

$$I_1 = -D_{12}\operatorname{grad} c_1 - D_T c_1(1-c_1)\operatorname{grad} T. \qquad (43{,}4)$$

Знак коэффициентов диффузии и термодиффузии определен требованием, чтобы возникновение энтропии ($\delta\dot{S}$) было положительным. Полученные соотношения могут применяться к любым бинарным смесям и изотропной (жидкой или газовой) фазе, при любых значениях концентрации, но при малых значениях градиентов температуры и концентрации. Точно так же можно найти выражения для потока при наличии внешних сил (например, при миграции ионов в электрическом поле или при существовании химических реакций между компонентами). Обобщение на случай многокомпонентных систем не представляет никакого труда.

Мы предполагали в ходе вывода, что термомеханический эффект в системе с непрерывно изменяющимися параметрами отсутствует (т. е. $\operatorname{grad} p = 0$). Постоянство давления имеет место всегда, когда отсутствует средний поток вещества $(\boldsymbol{I}_1 + \boldsymbol{I}_2) = 0$ и система описывается макроскопическими законами.

Сравнивая полученный результат с выводами § 25, мы ясно видим, что их взаимоотношение, такое же как и между результатами термодинамического и статистического описания. Из кинетической теории газов был найден молекулярный смысл всех величин, но для простейшего случая идеального газа малой концентрации ($c_1 \ll 1$). В термодинамике необратимых процессов получаются весьма общие соотношения, но содержащие постоянные, смысл и значения которых остаются не известными и которые должны определяться из опытных данных.

Последним и, может быть, наименее тривиальным примером применения термодинамики необратимых процессов может служить теория термоэлектрических явлений. Рассмотрим явления, возникающие в термопаре из двух различных металлических проводников, спаи которых поддерживаются при разных температурах $T_1$ и $T_2$. В цепь подана э. д. с., так что в системе имеется поток тепла и электрический ток. Мы будем считать, что процессы имеют стационарный характер. Мы можем написать для потоков общие выражения

$$I_e = L_{11}\delta\left(\frac{\mu}{T}\right) + L_{12}\delta\left(\frac{1}{T}\right), \tag{43,5}$$

$$I_E = L_{21}\delta\left(\frac{1}{T}\right) + L_{22}\delta\left(\frac{\mu}{T}\right). \tag{43,6}$$

В электрическом поле [см. § 59 ч. III]

$$\mu = \mu_0 + e\varphi,$$

где $\varphi$ — потенциал поля.

Поэтому (43,5)—(43,6) удобно представить в виде

$$I_e = -L'_{11}\frac{\delta\varphi}{T} - L'_{12}\frac{\delta T}{T^2}, \tag{43,7}$$

$$I_E = -L'_{21}\frac{\delta\varphi}{T} - L'_{22}\frac{\delta T}{T^2}, \tag{43,8}$$

где $\delta\varphi$ — э. д. с. и $\delta T = T_1 - T_2$.

Соотношение Онзагера гласит:

$$L'_{12} = L'_{21}.$$

Коэффициенты в уравнениях (43,7) и (43,8) могут быть выражены через электропроводность $\sigma$ и теплопроводность $\lambda$. Именно, полагая $\Delta T = 0$, находим

$$I_e = -\frac{L'_{11}}{T}\delta\varphi = \sigma\,\delta\varphi, \tag{43,9}$$

так что $\sigma = -\frac{L'_{11}}{T}$. Полагая $I_e = 0$, $\Delta T \neq 0$, имеем

$$0 = \sigma\,\delta\varphi - L'_{12}\frac{\delta T}{T^2}, \tag{43,10}$$

$$I_E = -L'_{12}\frac{\delta\varphi}{T} - L'_{22}\frac{\delta T}{T^2} = \lambda\,\delta T, \tag{43,11}$$

откуда

$$\lambda = \frac{\left\{(L'_{12})^2 - L'_{11}L'_{22}\right\}}{L'_{11}T^2}.$$

Рассмотрим частные случаи формул (43,10) и (43,11). Пусть спай нагревается в разомкнутой цепи ($I_l = 0$). Тогда в цепи возникает термо-э. д. с.

$$\delta\varphi = -\frac{L'_{12}}{L'_{11}T}\,\delta T. \tag{43,12}$$

Появление разности потенциалов в разомкнутой цепи носит название эффекта Зеебека. При прохождении тока между разными проводниками в изотермических условиях ($\delta T = 0$) происходит перенос энергии и выделяется некоторое количество тепла, именуемого теплом Пельтье. Полагая в (43,10) и (43,11) $\delta T = 0$, находим

$$I_E = \frac{L'_{21}}{L'_{11}}\,I_e = \Pi_{12} I_e, \tag{43,13}$$

где $\Pi_{12}$ — тепло, выделяемое при прохождении тока $I_e = 1$.

Сравнивая (43,12) и (43,13) и пользуясь соотношением взаимности Онзагера, находим

$$\frac{\delta\varphi}{\delta T} = -\frac{\Pi_{12}}{T}. \tag{43,14}$$

Последняя формула носит название второго соотношения Томсона. Она содержит только непосредственно измеряемые величины и хорошо согласуется с опытом. Следует заметить, что для ее вывода непосредственно требуется использование соотношения взаимности. В цитируемой книге де-Гроота очень ясно показано, каким образом неявное использование этого соотношения позволило Томсону получить формулу (43,14) из термодинамических соображений, явно неприменимых к рассматриваемым явлениям.

В заключение заметим, что существенная положительность теплопроводности требует выполнения неравенства $L'_{11}L'_{22} - (L'_{12})^2$. В книге де-Гроота приведено доказательство этого неравенства.

## § 44. Флуктуационно-диссипативная теорема

В § 29 ч. IV мы обсудили уже флуктуационно-диссипативную теорему. При этом было указано, что область применимости флуктуационно-диссипативной теоремы гораздо шире, чем это следует из приведенного там доказательства. Квантовомеханический вывод флуктуационной теоремы, к изложению которого мы можем перейти, показывает, что флуктуационно-диссипативная теорема применима при таких частотах и температурах, когда квантовые эффекты имеют основное значение.

Существует множество различных способов доказательства флуктуационно-диссипативной теоремы, из которых мы выбрали самый простой и непосредственный[1]).

Пусть на систему частиц, находящуюся в термостате, действует динамическое возмущение (внешняя сила), изменяющееся во времени по гармоническому закону.

Для конкретности положим, что возмущенная сила имеет вид

$$\boldsymbol{F} = e\boldsymbol{E}_0 e^{i\omega t}, \tag{44,1}$$

где $\boldsymbol{E}_0$ — однородное электрическое поле.

Возмущению (44,1) в гамильтониане отвечает слагаемое вида

$$\hat{H}' = e\boldsymbol{E}_0 \boldsymbol{r} e^{i\omega t}. \tag{44,2}$$

Необходимо подчеркнуть, что последующие доказательства справедливы для любой пары величин в гамильтониане, для которых возмущение имеет вид

$$\hat{H}' = (\hat{\xi}\boldsymbol{F}). \tag{44,3}$$

Здесь $\hat{\xi}$ — оператор, отвечающий некоторому параметру $\xi$. Что же касается допущений об однородности поля и его изменению по гармоническому закону, то всегда можно разложить (44,3) в интеграл Фурье и рассматривать действие каждой гармоники.

Поэтому фактически мы не ограничиваем общности, принимая возмущение вида (44,1).

Возмущение $\hat{H}'$, зависящее от времени, вызывает в системе переходы. В результате в системе поглощается энергия, диссипирующаяся в тепло.

Поглощаемую энергию в единицу времени, т. е. поглощаемую мощность, можно представить в виде

$$Q = \left\langle \sum_{k>l} \hbar\omega_{kl} w_{lk} - \sum_{l>k'} \hbar\omega_{lk'} w_{lk'} \right\rangle. \tag{44,4}$$

Первое слагаемое представляет поглощенную, второе — излучаемую (в единицу времени) энергию. Усреднение производится по равновесному распределению Гиббса. Вероятности прямых (с поглощением) и обратных (с излучением) переходов, отнесенные к интервалу частот $d\omega$, согласно (56,9) ч. V равны

$$w_{lk} = \frac{\pi}{2\hbar^2} |H'_{lk}|^2 \delta(\omega - \omega_{kl}), \qquad w_{kl} = \frac{\pi}{2\hbar^2} |H'_{kl}|^2 \delta(\omega - \omega_{lk}).$$

Соответственно

$$Q = \frac{\pi}{2\hbar^2} \left\{ \sum \hbar\omega_{kl}\rho_l |H'_{kl}|^2 \delta(\omega - \omega_{lk}) - \sum \hbar\omega_{lk}\rho_l |H'_{lk}|^2 \delta(\omega - \omega_{lk}) \right\}, \tag{44,5}$$

где $\rho_l$ — распределение Гиббса.

---

[1]) Л. Д. Ландау и Е. М. Лифшиц, Статистическая физика, «Наука», 1964.

Поскольку суммирование ведется по индексам $l$ и $k$, можно заменять индексы суммирования. Выполняя эту замену во второй сумме (40,6), получаем

$$Q=\frac{\pi}{2\hbar^2}\left\{\sum \hbar\omega_{kl}\rho_l\,|H'_{lk}|^2\,\delta(\omega-\omega_{kl})-\sum \hbar\omega_{kl}\rho_k\,|H'_{lk}|^2\,\delta(\omega-\omega_{kl})\right\}=$$

$$=\frac{\pi}{2\hbar^2}\sum \hbar\omega_{kl}\,|H'_{lk}|^2\,(\rho_l-\rho_k)\,\delta(\omega-\omega_{kl})=$$

$$=\frac{\pi}{2\hbar^2 Z}\sum \hbar\omega_{kl}\,|H'_{lk}|^2\,e^{-\frac{\varepsilon_l}{kT}}\left(1-e^{-\frac{\varepsilon_k-\varepsilon_l}{kT}}\right)\delta(\omega-\omega_{lk})=$$

$$=\frac{\pi\omega}{2\hbar Z}\left(1-e^{-\frac{\hbar\omega}{kT}}\right)\sum |H'_{lk}|^2\,e^{-\frac{\varepsilon_l}{kT}}\,\delta(\omega-\omega_{kl}). \quad (44,6)$$

При этом, воспользовавшись присутствием $\delta$-функции, мы положим $\omega'_{kl}=\omega$.

Оказывается, что $Q$ можно связать с временно́й коррелятивной функцией оператора $\hat{\xi}$, точнее, с фурье-компонентой этой функции. Тогда мы установим связь между диссипируемой мощностью и коррелятивной функцией, т. е. получим искомое обобщение флуктуационно-диссипативной теоремы (см. § 29 гл. IV).

Классическое определение коррелятивной функции следует несколько модифицировать. Действительно, значения оператора в гейзенберговском представлении, взятые в различные моменты времени, вообще говоря, не коммутативны, так что

$$\hat{\xi}(t)\,\hat{\xi}(t+\tau)\neq\hat{\xi}(t+\tau)\,\hat{\xi}(t).$$

С другой стороны, моменты времени $t$ и $t+\tau$ совершенно равноправны. Поэтому естественно определить коррелятивную функцию квантовомеханического оператора, зависящего от времени, для статистической системы как симметризованное выражение

$$\frac{1}{2}\langle\hat{\xi}(t)\,\hat{\xi}(t+\tau)+\hat{\xi}(t+\tau)\,\hat{\xi}(t)\rangle=$$

$$=\frac{1}{2}\,\mathrm{Sp}\,\{\rho_0,\ \hat{\xi}(t)\,\hat{\xi}(t+\tau)+\hat{\xi}(t+\tau)\,\hat{\xi}(t)\}=$$

$$=\frac{1}{2Z}\,\mathrm{Sp}\left\{e^{-\frac{\hat{H}}{kT}},\ \hat{\xi}(t)\,\hat{\xi}(t+\tau)+\hat{\xi}(t+\tau)\,\hat{\xi}(t)\right\}. \quad (44,7)$$

Учитывая зависимость операторов от времени по формуле (31,2) гл. V, можем написать

$$\frac{1}{2}\langle\hat{\xi}(t)\,\hat{\xi}(t+\tau)+\hat{\xi}(t+\tau)\,\hat{\xi}(t)\rangle=\frac{1}{2Z}\sum|\xi_{lk}|^2\,e^{-\frac{\varepsilon_l}{kT}}\left(e^{i\omega_{kl}\tau}+e^{-i\omega_{kl}\tau}\right). \quad (44,8)$$

Найдем теперь компоненту Фурье от коррелятивной функции, определенной (44,8).

Имеем, очевидно

$$g_\xi(\omega)=\frac{1}{2\pi}\int\limits_{-\infty}^{\infty}\frac{1}{2}\langle\hat{\xi}(t)\,\hat{\xi}(t+\tau)+\hat{\xi}(t+\tau)\cdot\hat{\xi}(t)\rangle\,e^{-i\omega\tau}\,d\tau=$$

$$=\frac{1}{4\pi Z}\sum_{l,k}|\xi_{lk}|^2 e^{-\frac{\varepsilon_l}{kT}}\int\limits_{-\infty}^{\infty}\left(e^{i(\omega_{kl}-\omega)\tau}+e^{-i(\omega_{kl}+\omega)\tau}\right)d\tau=$$

$$=\frac{1}{2Z}\sum_{l,k}|\xi_{lk}|^2 e^{-\frac{\varepsilon_l}{kT}}\left[\delta(\omega-\omega_{kl})+\delta(\omega+\omega_{kl})\right].$$

Производя во втором слагаемом замену индексов суммирования, находим окончательно:

$$g_\xi(\omega)=\frac{\left(1+e^{-\frac{\hbar\omega}{kT}}\right)}{2Z}\sum_{l,k}e^{-\frac{\varepsilon_l}{kT}}|\xi_{lk}|^2\,\delta(\omega-\omega_{kl}).\qquad(44,9)$$

Мы видим, что диссипируемая мощность выражается через фурье-компоненту коррелятивной функции:

$$Q=\frac{\pi\omega}{\hbar}\,\mathrm{th}\frac{\hbar\omega}{2kT}\cdot g(\omega).\qquad(44,10)$$

Таким образом, диссипируемая мощность в совершенно произвольной системе полностью определяется коррелятивной функцией, т. е. флуктуативной характеристикой системы, находящейся в состоянии термодинамического равновесия. При этом мы не делали каких-либо предположений о малости флуктуационных отклонений.

Формулу (44,10) можно переписать в другом виде, если заметить, что согласно (43,3) ч. III средняя энергия линейного осциллятора дается формулой

$$\bar{\varepsilon}=\frac{\hbar\omega}{2}\,\mathrm{ctg}\frac{\hbar\omega}{2kT}.$$

Поэтому

$$g_\xi(\omega)=\frac{\hbar}{\pi\omega}\,\mathrm{ctg}\frac{\hbar\omega}{2kT}\,Q=\frac{2}{\pi}\frac{\bar{\varepsilon}}{\omega^2}\,Q.\qquad(44,11)$$

Чтобы установить непосредственную связь полученных результатов с формулой Найквиста (см. § 29 гл. IV), введем коррелятивную функцию для тока в некотором проводнике.

Пусть в проводнике течет ток $j(\omega)$ и при этом происходят произвольные диссипативные процессы.

Если на каждую частицу в теле действует возмущение (44,3), то для диссипируемой мощности имеем

$$Q = \frac{\pi\omega}{2\hbar}\left(1 - e^{-\frac{\hbar\omega}{kT}}\right)\frac{e^2E_0^2}{Z}\sum |r_{lk}|^2 e^{-\frac{\varepsilon_l}{kT}}\delta(\omega - \omega_{kl}).$$

Но из определения возмущения (44,3), тока и коррелятивной функции следует, что

$$g_j(\omega) = e^2\omega^2 g_r(\omega).$$

Поэтому, выражая $g_j(\omega)$ через $Q$, находим

$$g_j(\omega) = \frac{\hbar\omega}{\pi E_0^2}\operatorname{ctg}\frac{\hbar\omega}{2kT}\cdot Q = \frac{\hbar\omega}{2\pi}\operatorname{cth}\frac{\hbar\omega}{2kT}\cdot R(\omega), \qquad (44,12)$$

где $R(\omega) = \operatorname{Re} Z(\omega)$ — вещественная часть импеданса, зависящего от частоты.

В классическом пределе $\hbar\omega \ll kT$ выражение (44,12) переходит в обобщенную формулу Найквиста (29,15) гл. IV

$$g_j(\omega) = \frac{kT}{\pi}R(\omega). \qquad (44,13)$$

Наряду с формулой (44,1) можно написать выражение, связывающее коррелятивную функцию с мнимой частью диэлектрической проницаемости, если воспользоваться формулой (31,38) гл. IV. Последняя выражает диссипируемую мощность через $\varepsilon^{im}(\omega)$. Таким образом, оказывается, что флуктуативные свойства системы, характеризуемые коррелятивными функциями $g_\xi(\omega)$, полностью определяются функцией $\varepsilon^{im}(\omega)$.

ГЛАВА V

# ТЕОРИЯ ТВЕРДОГО ТЕЛА

## § 45. Твердое тело как квантовомеханическая система

Теория твердого тела явилась одной из тех областей физики, где применение квантовомеханических представлений оказалось особенно плодотворным. Только на этой основе удалось сформулировать принципы теории твердого тела, создать теорию равновесных и кинетических свойств металлов, полупроводников и диэлектриков, понять сущность различия между ними, объяснить многочисленные и своеобразные явления в твердых телах, казавшиеся долгое время парадоксальными (например, сверхпроводимость или ферромагнетизм).

В настоящее время квантовая теория твердого тела достигла той стадии развития, когда она позволяет предсказывать новые, тонкие и своеобразные явления в твердых телах.

На первый взгляд тот факт, что в макроскопических объектах, которыми являются твердые тела, могут проявляться квантовые эффекты, кажется парадоксальным. Следует, однако, помнить, что каждый монокристалл представляет, по существу, одну гигантскую молекулу (ср. § 50 ч. III). Поэтому в самой основе тепловых, электрических и других свойств твердых тел лежат квантовые эффекты. Мы видели это в гл. VII ч. III, где были изложены некоторые качественные основы теории кристаллических решеток. В рамках этой книги мы ограничимся, естественно, изложением общих принципов квантовой теории твердого тела.

Для более детального ознакомления следует обратиться к специальным руководствам[1]).

Всякое макроскопическое твердое тело представляет систему из огромного числа сильно взаимодействующих между собой частиц. Ясно, что для построения теории твердого тела необходимо не только сочетание квантовомеханического и статистического описания, но и существенное упрощение и схематизация

---

[1]) Особенно рекомендуем: Д. Займан, Принципы теории твердого тела, «Мир», 1966; Р. Пайерлс, Квантовая теория твердых тел, ИЛ, 1956; А. Ансельм, Введение в теорию полупроводников, Физматгиз, 1963.

существующих взаимодействий между частицами. Последнее означает, что необходимо создать модель твердого тела, достаточно адекватную самому объекту, передающую его основные черты и неучитывающую второстепенные и несущественные детали.

В основу дальнейшего рассмотрения будет положена следующая модель: твердое тело представляет совокупность ионов и валентных электронов. Под ионами понимаются атомные ядра вместе со всеми электронами в заполненных оболочках. Взаимодействие электронов заполненных оболочек с ядром является столь сильным, что сближение атомов и образование кристалла не оказывает на него существенного влияния.

Мы будем отвлекаться от внутренней структуры ионов и предполагать, что электроны замкнутых оболочек каждого иона взаимодействуют только с собственными ядрами. Ионы мы будем считать точечными частицами, обладающими массами $M$ (одинаковыми в случае простых веществ и разными для химических соединений).

Ясно, однако, что при сближении ионов до расстояний порядка их собственных размеров валентные электроны данного атома вступают в сильное взаимодействие с соседними ядрами и их электронными оболочками. Это взаимодействие обеспечивает возникновение химической связи между ионами, именуемую в случае кристаллов силами сцепления. Поэтому валентные электроны нельзя считать локализованными у данного атома и в некоторых случаях они получают возможность перемещаться по всему кристаллу. Наличие валентных электронов не является обязательным признаком твердого тела. Например, их нет в кристаллах элементов нулевой группы. В таких кристаллах связь между атомами, образующими решетку, имеет характер ван-дер-ваальсовых сил. В ковалентных кристаллах в узлах решетки также помещаются не ионы, а нейтральные атомы. Поэтому часто вместо того, чтобы говорить об ионах, говорят о ядрах, находящихся в узлах кристаллической решетки. Однако в подавляющем большинстве явлений, происходящих в твердых телах, электроны играют самую существенную роль. Поэтому мы рассмотрим самый общий случай, когда в кристалле содержатся ионы и валентные электроны.

Пусть $\boldsymbol{R}_i$ означает координаты ионов (ядер), а $\boldsymbol{r}_k$ — соответственно координаты валентных электронов. Тогда гамильтониан системы ионов и электронов можно представить в виде

$$\hat{H} = -\sum_{i} \frac{\hbar^2}{2M} \Delta_i - \sum_{k} \frac{\hbar^2}{2m} \Delta_k + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{e^2}{|\boldsymbol{r}_i - \boldsymbol{r}_j|} + \sum_{i > j} U(\boldsymbol{R}_i - \boldsymbol{R}_j) + \sum_{i > j} U(\boldsymbol{r}_i - \boldsymbol{R}_j). \quad (45,1)$$

Первая сумма (по всем ионам) представляет их кинетическую энергию. Вторая сумма дает кинетическую энергию всех (валентных) электронов. Три последних слагаемых описывают соответственно кулоновское взаимодействие между электронами, взаимодействие между ионами и взаимодействие между ионами и электронами. Это взаимодействие зависит от расстояний между соответствующими частицами. В первых двух суммах индексы частиц должны быть разными, во второй они могут совпадать и множитель $^1/_2$ отсутствует.

В основу теории твердого тела положено допущение о возможности использования адиабатической теории возмущений. Совокупность валентных электронов считается быстрой подсистемой, а совокупность ядер и связанных с ними электронов замкнутых оболочек — медленной подсистемой. В этом приближении полную волновую функцию системы $\Psi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2, \ldots; \boldsymbol{R}_1, \boldsymbol{R}_2, \ldots)$ можно представить в виде

$$\Psi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2, \ldots; \boldsymbol{R}_1, \boldsymbol{R}_2, \ldots) = \\ = \Psi_l(\boldsymbol{R}_1, \boldsymbol{R}_2, \ldots, \boldsymbol{R}_N)\,\Psi_{el}(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2, \ldots; \boldsymbol{R}_1, \boldsymbol{R}_2, \ldots, \boldsymbol{R}_N), \quad (45,2)$$

где $\Psi_l$ — волновая функция системы ионов, а $\Psi_{el}$ — волновая функция системы электронов. В адиабатическом приближении эти волновые функции удовлетворяют уравнениям [ср. (57,7) — (57,8) ч. V]:

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\sum_k \Delta_k + \frac{1}{2}\sum_{i \neq j} \frac{e^2}{|\boldsymbol{r}_i - \boldsymbol{r}_j|} + \sum_{i > j} U(\boldsymbol{r}_i - \boldsymbol{R}_j)\right\}\Psi_{el} = \\ = E_{el}(\boldsymbol{R}_1, \boldsymbol{R}_2, \ldots, \boldsymbol{R}_N)\,\Psi_{el}, \quad (45,3)$$

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2M}\sum_i \Delta_i + \sum_{i > j} V(\boldsymbol{R}_i - \boldsymbol{R}_j) + E_{el}(\boldsymbol{R}_1, \boldsymbol{R}_2, \ldots, \boldsymbol{R}_N)\right\}\Psi_l = E\Psi_l. \quad (45,4)$$

В этом приближении в уравнении для волновой функции быстрой подсистемы не входят импульсы (производные по координатам) частиц медленной подсистемы. Это означает, что электроны движутся при заданных положениях тяжелых ионов. Каждому изменению последних отвечает перераспределение электронов, которые всегда успевают подстраиваться к изменившемуся расположению ионов. Поэтому в потенциальную энергию взаимодействия между электронами и ионами координаты последних входят только как параметры. Энергия валентных электронов в свою очередь, является составной частью потенциальной энергии системы ионов.

В последнее время было обосновано применение адиабатического приближения к рассмотрению твердого тела и выяснены границы его применимости.

В адиабатическом приближении удается, до известной степени, разделить движение электронов и ионов. Зная энергию взаимодействия электронов и ионов и считая положения ионов заданными, можно в принципе решить уравнение (45,3) и найти энергию $E_{el}$ системы электронов, зависящую, разумеется, от положений ионов. Это значение $E_{el}$ должно быть использовано затем для решения уравнения (45,4).

Ясно, однако, что фактическое осуществление этой программы связано с непреодолимыми трудностями, поскольку каждое из уравнений (45,3) и (45,4) содержит макроскопически большое число переменных. Поэтому современная теория твердого тела связана с рассмотрением упрощенных моделей, отражающих важнейшие особенности их поведения.

## § 46. Кристаллическая решетка

Мы начнем с обсуждения свойств медленной подсистемы, т. е. со свойств системы ионов. Уравнение (45,4) полностью определяет поведение этой системы. Его решение должно прежде всего дать ответ на вопрос о том, как образуется твердое тело, т. е. тело с правильным расположением тяжелых частиц в узлах кристаллической решетки. Ясно, однако, что не может быть и речи о точном решении этого уравнения. Поэтому задача о расчете сил сцепления, удерживающих кристалл, и выяснении той роли, которую играют в них ван-дер-ваальсовы и обменные силы, а также имеющиеся в системе валентные электроны, является самой трудной в теории твердого тела. Она еще не может считаться решенной до конца, хотя и в ней получены очень существенные результаты.

Мы не можем здесь излагать эту проблему и ограничимся лишь качественными соображениями. Ясно прежде всего, что взаимодействие между ионами (или атомами в случае ковалентных кристаллов) обеспечивает в принципе возникновение кристаллической структуры. Минимуму энергии системы отвечает правильное их расположение в пространстве на некоторых расстояниях друг от друга. В случае ковалентных кристаллов между атомами происходит обменное взаимодействие, которому отвечает притяжение на больших и очень сильное отталкивание на малых расстояниях. В случае ионных кристаллов притяжение имеет электростатический характер, тогда как отталкивание обусловлено сложным взаимодействием между атомными остатками, возникающими на малых расстояниях. В металлах существенный вклад в силы сцепления дают валентные электроны, сильно ослабляющие взаимодействие между ионами. В результате взаимодействия атомы или ионы размещаются на расстояниях, отвечающих минимуму энергии. Эти расстояния не

отличаются от расстояний между атомами в молекулах (1—2 Å). Соответственно этому энергия сцепления, отнесенная к одному атому, имеет тот же порядок величины, что и энергия химической связи, и колеблется от 1 *эв* (у металлов) до 10 *эв* (у ионных кристаллов типа поваренной соли) в расчете на одну частицу.

Правильное расположение ионов или атомов в узлах кристаллической решетки играет важнейшую роль и определяет многие физические свойства твердых тел. Поэтому нам в дальнейшем понадобятся элементы геометрии кристаллической решетки.

Основным геометрическим свойством кристаллической решетки является ее трансляционная симметрия.

Отвлечемся от конечных размеров кристалла и будем считать, что он заполняет все пространство. Свойство трансляционной симметрии позволяет ввести тройку базисных векторов $\boldsymbol{a}$, $\boldsymbol{b}$, $\boldsymbol{c}$. При трансляции кристалла в пространстве на вектор

$$\boldsymbol{n} = n_1\boldsymbol{a} + n_2\boldsymbol{b} + n_2\boldsymbol{c}, \quad (46,1)$$

где $n_1$, $n_2$ и $n_3$ — целые числа, он совпадает сам с собой (при этом предполагается, что начало вектора $\boldsymbol{n}$ совпадает с одним из узлов решетки).

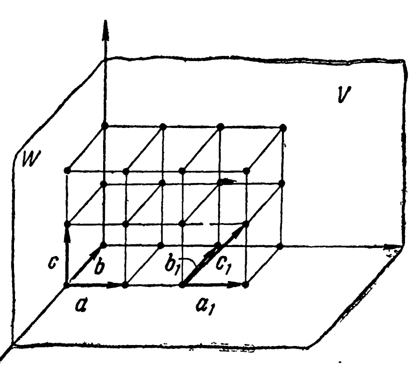


Рис. 41.

Базисные векторы определяют главные кристаллографические направления, в которых можно производить трансляции. То же самое можно сформулировать и несколько иначе. Построим на трех базисных векторах $\boldsymbol{a}$, $\boldsymbol{b}$, $\boldsymbol{c}$ параллелепипед. Этот параллелепипед называется элементарной ячейкой. Тогда весь кристалл, заполняющий бесконечное пространство, получается бесконечным повторением элементарных ячеек. Следует заметить, что сам выбор базисных векторов является не вполне однозначным. Это проще всего видно на рис. 41, на котором изображена простая кубическая решетка. В качестве базисных векторов могут быть выбраны три вектора, $\boldsymbol{a}$, $\boldsymbol{b}$, $\boldsymbol{c}$, или три вектора $\boldsymbol{a}_1$, $\boldsymbol{b}_1$, $\boldsymbol{c}_1$.

Мы видим, что если атомы решетки однотипны, все узлы решетки получаются трансляцией одной точки решетки на вектор $\boldsymbol{n}$ при различных значениях целых чисел $n_1$, $n_2$ и $n_3$. В этом случае говорят, что элементарная ячейка содержит один атом (в узле решетки). Такая решетка называется решеткой Бравэ.

Если в элементарной ячейке помещаются два или более атома, то тогда говорят, что кристалл имеет решетку с базисом. Решетка с базисом представляет совокупность вдвинутых одна в другую простых решеток. Например, в элементарной ячейке кристалла поваренной соли содержится атом натрия и атом хлора. Атомы натрия и хлора образуют простые кубические решетки, сдвинутые друг по отношению к другу на половину ребра куба. Значения базисных векторов называются постоянными решетки.

Постоянная решетки представляет расстояние (в данном главном кристаллографическом направлении) между ближайшими соседями.

Мы не будем останавливаться на разборе возможных элементов симметрии и кристаллических классах. Укажем лишь, что преобразования трансляций не являются единственным преобразованием симметрии, совмещающим кристалл сам с собой. Другими преобразованиями симметрии являются повороты и отражения.

В дальнейшем мы будем часто встречаться с понятием обратной решетки. Под обратной решеткой понимают решетку, построенную на базисных векторах $\boldsymbol{a}_1$, $\boldsymbol{b}_1$ и $\boldsymbol{c}_1$, определенных формулами

$$\boldsymbol{a}_1 = 2\pi \frac{[\boldsymbol{bc}]}{\boldsymbol{a}\,[\boldsymbol{bc}]}; \qquad \boldsymbol{b}_1 = 2\pi \frac{[\boldsymbol{ca}]}{\boldsymbol{a}\,[\boldsymbol{bc}]}; \qquad \boldsymbol{c}_1 = 2\pi \frac{[\boldsymbol{ab}]}{\boldsymbol{a}\,[\boldsymbol{bc}]}. \qquad (46,2)$$

Вектор обратной решетки $\boldsymbol{K}$ связан с базисными векторами $\boldsymbol{a}_1$, $\boldsymbol{b}_1$ и $\boldsymbol{c}_1$ соотношением

$$\boldsymbol{K} = \boldsymbol{a}_1 m_1 + \boldsymbol{b}_1 m_2 + \boldsymbol{c}_1 m_3, \qquad (46,3)$$

где $m_1$, $m_2$ и $m_3$ — целые числа.

Очевидно, что

$$\boldsymbol{Ka} = 2\pi m_1, \qquad \boldsymbol{Kb} = 2\pi m_2, \qquad \boldsymbol{Kc} = 2\pi m_3. \qquad (46,4)$$

Важность вектора обратной решетки связана с тем, что всегда имеет место равенство

$$\boldsymbol{Kn} = 2\pi (n_1 m_1 + n_2 m_2 + n_3 m_3) = 2\pi N, \qquad (46,5)$$

где $N$ — целое число.

Благодаря этому часто встречающееся выражение $e^{i\boldsymbol{Kr}}$ при $\boldsymbol{r} = \boldsymbol{n}$, т. е. при совпадении вектора $\boldsymbol{r}$ с одним из узлов решетки, обращается в единицу

$$e^{i\boldsymbol{Kn}} = e^{i2\pi N} = 1. \qquad (46,6)$$

Заметим, что объем элементарной ячейки для решетки, построенной на векторах обратной решетки, связан с объемом

элементарной ячейки прямой решетки соотношением

$$V_б = (\boldsymbol{a}_1 [\boldsymbol{b}_1 \boldsymbol{c}_1]) = (2\pi)^3 \frac{[\boldsymbol{bc}] \{[\boldsymbol{ca}][\boldsymbol{ab}]\}}{\{\boldsymbol{a}[\boldsymbol{bc}]\}^2} = \frac{(2\pi)^3}{\boldsymbol{a}[\boldsymbol{bc}]} = \frac{(2\pi)^3}{v_0}, \quad (46,7)$$

где $v_0$ — объем элементарной прямой решетки.

## § 47. Колебания решетки

Ионы, или атомы, расположенные в узлах кристаллической решетки, находятся в тепловом движении и колеблются около положений равновесия. В твердых кристаллах при температурах ниже температуры плавления амплитуда этих колебаний мала по сравнению с постоянной решетки.

Обозначим через $\boldsymbol{n}$ положение узла (равновесное положение) $\boldsymbol{n}$-го иона и через $\boldsymbol{\xi}_n$ — смещение $\boldsymbol{n}$-го атома так, что

$$\boldsymbol{R}_n = \boldsymbol{n} + \boldsymbol{\xi}_n. \quad (47,1)$$

Тогда, поступая точно так же, как это было сделано нами в § 50 ч. III в классическом приближении, мы можем разложить в ряд по степеням малых смещений потенциальную энергию $U(\boldsymbol{R}_i - \boldsymbol{R}_j)$. Мы видели в § 50 ч. III, что характер движения решетки существенно зависит от ее структуры. Уже само наличие ячейки с базисом (например, наличие двух сортов частиц с разными массами) приводит к появлению новых модов колебаний.

Поскольку нас в первую очередь интересует принципиальная сторона дела, мы не будем усложнять выкладок и ограничимся кристаллами с простой решеткой Бравэ. Более того, для простоты записи мы будем опускать векторные индексы, как будто бы кристалл был одномерной цепочкой. Тогда можно написать вблизи положений равновесия

$$U(R_n - R_{n'}) = U(n - n') + \sum_{n', n} \frac{\partial^2 U}{\partial R_n \, \partial R_{n'}} \xi_n \xi_{n'} + \frac{1}{6} \sum_{n, n', n''} \frac{\partial^3 U}{\partial R_n \, \partial R_{n'} \, \partial R_{n''}} \xi_n \xi_{n'} \xi_{n''} + \ldots \quad (47,2)$$

Ограничиваясь двумя членами разложения, можно написать гамильтониан в форме

$$H = H_0 + \sum_n \frac{P_n^2}{2M} + \sum_{n, n'} a_{nn'} \xi_n \xi_{n'}, \quad (47,3)$$

где в $H_0$ включены все слагаемые, не зависящие от смещений.

Уравнения движения гласят:

$$\dot{P}_n = M\ddot{\xi}_n = -\sum_{n'} a_{nn'}\xi_{n'}. \tag{47,4}$$

Решениями уравнений движения, удовлетворяющими условиям трансляционной симметрии, служат функции

$$\xi_n = \sum_f q_n e^{i(fn-\omega_f t)}. \tag{47,5}$$

Подстановка (47,5) в (47,4) дает

$$M\omega_f^2 = \sum_{n'} a_{nn'} e^{if(n-n')}. \tag{47,6}$$

Напомним, что значения волнового числа определяются из граничных условий. Если в качестве граничных условий выбрать условия периодичности на длине $L = Na$, то

$$f = \pm\frac{\pi}{a}\frac{m}{N} \qquad (m = 1,\ 2,\ \ldots,\ N). \tag{47,7}$$

Волновое число $f$ в решетке определено не точно, но с точностью до величины $\frac{2\pi}{a}$: при замене $f \to f + \frac{2\pi}{a}$ смещение не изменяется. Мы будем нормировать волновые числа в интервале

$$-\frac{\pi}{a} \leqslant f \leqslant \frac{\pi}{a}. \tag{47,8}$$

В одномерной цепочке вектор обратной решетки равен $\frac{2\pi}{a}$. Поэтому можно сказать, что вектор $f$ лежит внутри первой зоны Бриллюэна. Не повторяя вычислений § 50 ч. III, перейдем к нормальным координатам, введя переменные $p_f$ и $q_f$ соотношениями

$$p_n = \left(\frac{M}{N}\right)^{1/2} \sum_f e^{ifn} p_f, \tag{47,9}$$

$$\xi_n = \frac{1}{(MN)^{1/2}} \sum_f e^{ifn} q_f. \tag{47,10}$$

Поскольку $p_n$ и $q_n$ вещественные величины, имеют место равенства

$$\left.\begin{aligned} p_{-f} &= p_f^*, \\ q_{-f} &= q_f^*. \end{aligned}\right\} \tag{47,11}$$

Подставляя (47,9) и (47,10) в (47,3), с учетом (47,6), находим

$$H = H_0 + \frac{1}{2} \sum_f (p_f^2 + \omega_f^2 q_f^2). \qquad (47,12)$$

Второе слагаемое в (47,12) представляет гамильтониан системы независимых осцилляторов с частотами $\omega_f$. Переход к квантовому гамильтониану совершается, как обычно, путем замены $p_f$ и $q_f$ операторами, удовлетворяющими перестановочным соотношениям (26,2) — (26,4) ч. V.

Сравнивая выражения (47,5) и (47,12) с соответствующими формулами для операторов электромагнитного поля, мы убеждаемся в их формальной тождественности.

Как и в случае электромагнитного поля, удобно ввести операторы рождения $\hat{b}_f$ и уничтожения $\hat{b}_f^+$, удовлетворяющие перестановочным соотношениям (101,3) ч. V.

Пользуясь результатами § 101 ч. V, мы можем сразу написать квантованную энергию решетки

$$E = \sum_f \left(\hat{b}_f^+ \hat{b}_f + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega_f = \sum_f \left(n_f + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega_f. \qquad (47,13)$$

Так же как и в случае электромагнитного поля, системе квантованных волн можно сопоставить систему независимых квантовых частиц — бозонов, получивших название фононов. Формула (47,13) показывает, что энергия фонона с волновым числом $f$ равна $\hbar\omega_f$.

При переходе к трехмерному кристаллу общая ситуация, по существу, усложняется лишь в малой степени. Смещение $\xi_n$ можно представить в виде вектора

$$\xi_n = \sum_f \sum_{j=1}^{3} e_{fj} q_{fj} e^{i(fn - \omega_f t)}, \qquad (47,14)$$

где $e_{fj}$ — три вектора поляризации: продольной поляризации, при которой вектор $e_{f1}$ направлен параллельно вектору $f$, и поперечной, при которой векторы $e_{f2}$ и $e_{f3}$ перпендикулярны к вектору $f$. Из вещественности $\xi_n$ следует, что $q_{fj}^* = q_{-fj}$. Волновой вектор $f$ определен с точностью до вектора обратной решетки $\boldsymbol{K}$.

Гамильтониан трехмерной решетки имеет вид

$$H = \frac{1}{2} \sum_{fj} (p_{fj}^* p_{fj} + \omega_{fj}^2 q_{fj}^* q_{fj}). \qquad (47,15)$$

При данном значении $f$ существуют три фонона с частотами $\omega_{f1}$, $\omega_{f2}$ и $\omega_{f3}$.

В отличие от фотонов, у которых имеется линейная связь между частотой $\omega$ и волновым числом $f$, у фононов всегда имеется сложный закон дисперсии.

В линейной цепочке закон дисперсии определен формулой (50,13) ч. III, в трехмерном кристалле имеются разные законы дисперсии для различных поляризаций, т. е. $\omega_{fj} = \omega(f_j)$.

Лишь при малых значениях волнового вектора в кристаллах с кубической симметрией можно полагать

$$\omega_{fj} = \omega_f = cf, \tag{14,16}$$

где $c$ — скорость звука.

Для выполнения квантования удобно ввести операторы рождения $\hat{b}^+_{fj}$ и уничтожения $\hat{b}_{fj}$ фононов, положив

$$\hat{q}_{fj} = \sqrt{\frac{\hbar}{2M\omega_f}}\,\hat{b}_{fj}; \quad \hat{q}^+_{fj} = \sqrt{\frac{\hbar}{2M\omega_f}}\,\hat{b}^+_f. \tag{47,17}$$

Правила коммутации для операторов рождения и уничтожения фононов (101,3) ч. V следует записать в виде

$$\hat{b}_{fj}\hat{b}^+_{f'j'} - \hat{b}^+_{f'j'}\hat{b}_{fj} = \delta_{ff'}\delta_{jj'}. \tag{47,18}$$

При этом

$$E = \sum_f \sum_j \left(\hat{b}^+_{fj}b_{fj} + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega_{fj} = \sum_f \sum_j \left(n_{fj} + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega_{fj}. \tag{47,19}$$

Обобщение теории на случай решеток с базисом также не вносит принципиально новых моментов. В самом общем случае можно утверждать, что тепловое возбуждение решетки описывается системой элементарных независимых частиц — фононов.

Таким образом, описание коллективных возбуждений — волн в кристаллической решетке, весьма сходно с описанием поля электромагнитного излучения в полости. Необходимо, однако, подчеркнуть, что эта аналогия является до известной степени формальной. В то время как фотоны обладают той же степенью реальности, что и любые другие частицы — электроны, мезоны или протоны, — фононы являются фиктивными, формально введенными образованиями. Действительно, гамильтониан в форме (47,3), допускающий введение нормальных координат и преобразование к виду (47,19), не является точным. Он был получен в результате пренебрежения в формуле (47,2) членами третьего и более высокого порядка малости, т. е. в гармоническом приближении. Учет ангармоничности делает невозможным приведение гамильтониана к форме (47,3), т. е. к сумме квадратичных слагаемых. Поэтому сама возможность введения понятия фононов тесно связана с приближенным рас-

смотрением теплового движения кристаллической решетки. В отличие от истинных бозе-частиц — фотонов, фононы именуются квазичастицами. Отличие квазичастиц — фононов от истинных частиц — фотонов особенно наглядно проявляется в том, что фононам нельзя приписать определенное значение импульса. Действительно, импульс свободной частицы, как и ее энергия, пробегает непрерывный и ничем не ограниченный ряд значений. В любых взаимодействиях энергия и импульс сохраняются. У фонона роль импульса формально играет величина $\hbar \boldsymbol{f}$. Однако значения этой величины лежат в определенном интервале (47,8). Более того, значение вектора $\hbar \boldsymbol{f}$ определено не однозначно, но лишь с точностью до величины $\hbar \boldsymbol{K}$, где $\boldsymbol{K}$ — вектор обратной решетки. Поэтому вектор $\hbar \boldsymbol{f}$ получил название квазиимпульса. В отличие от истинного импульса, значение квазиимпульса при взаимодействиях фонона с другими фононами или электронами может не сохраняться. Кристаллическая решетка может произвольным образом добавить или отнять у фонона квазиимпульс $\hbar \boldsymbol{K}$. Несмотря на фиктивный характер квазичастиц — фононов, их введение оказалось весьма плодотворным. Оно является основной для рассмотрения всех процессов, происходящих в твердых телах. Более того, введение элементарных возбуждений как некоторых квазичастиц, является типичным для современной физики методом подхода к описанию возбужденных состояний в системах с большим числом частиц.

В ряде проблем возбуждение, отвечающее коллективному движению макроскопической системы, удается описать при помощи некоторых координат $X_i$ так, что полный гамильтониан системы $\hat{H}$ оказывается равным

$$\hat{H} = \sum \hat{H}_i, \qquad \text{где } \hat{H}_i = aP_i^2 + f(X_i).$$

При этом и энергия ситемы представляется в виде суммы

$$E = \sum E_i.$$

Очень часто оказывается при этом возможным найти такие переменные, в которых оператор Гамильтона $\hat{H}_i$ имеет вид, сходный с оператором Гамильтона для осциллятора. Тогда говорят, что коллективное возбуждение системы можно разложить на совокупность элементарных возбуждений. Собственным значениям $\hat{H}_i$, отвечающим $i$-й степени свободы коллективного движения, можно сопоставить энергию некоторой квазичастицы. Разобранный выше случай колебаний решетки кристалла как целого

приводит к одному из видов квазичастиц — фононам. Каждая квазичастица отвечает одной степени свободы коллективного движения системы. Введение квазичастиц имеет то преимущество, что оно позволяет сопоставить движению системы реальных взаимодействующих частиц систему невзаимодействующих или слабо взаимодействующих квазичастиц.

Энергетический спектр совокупности квазичастиц совпадает со спектром реальной системы. Возможность введения квазичастиц выявилась в ряде задач, связанных с теорией систем со многими частицами и главным образом в теории твердого тела. Поэтому в настоящее время в теоретической физике имеется множество квазичастиц, например, поляроны (электроны в полярных кристаллах, окруженные «облаком» фононов), экситоны (пара, образованная в полупроводнике электроном и дыркой); магноны (элементарные возбуждения в парамагнитных диэлектриках), плазмоны и т. п. Все эти квазичастицы не являются реально существующими частицами. Однако их формальное введение отражает характер процессов, происходящих в системах многих частиц, и позволяет пользоваться удобным и хорошо разработанным расчетным аппаратом.

Понятие о фононах является основным при рассмотрении движения электронов в кристаллической решетке. Мы увидим, что взаимодействие электронов с колеблющейся решеткой и рассеяние их на атомах решетки обусловливает появление электрического сопротивления. Это взаимодействие, как будет видно из дальнейшего, можно формально описывать как взаимодействие сталкивающихся частиц и электронов, свободно движущихся в объеме тела.

Для того чтобы понятие квазичастиц имело смысл, необходимо, чтобы их время жизни было достаточно велико. Если $\bar{\varepsilon}$ — средняя энергия квазичастицы, а $\Delta\varepsilon$ — неопределенность в ее энергии, то должно выполняться неравенство

$$\bar{\varepsilon} \gg \Delta\varepsilon \sim \frac{\hbar}{\tau}, \tag{47,20}$$

где $\tau$ — время жизни квазичастицы.

Процессами, определяющими длительность жизни квазичастиц, могут быть всякого рода процессы поглощения и рассеяния. В случае фононов источниками поглощения и рассеяния могут служить примеси в кристалле и ангармоничность, отвечающая столкновениям фононов между собой.

В чистом кристалле число примесей мало́. При низких температурах ангармоничность также мала. Поэтому при низких температурах, достаточно далеких от температуры плавления, время жизни фононов оказывается весьма малым и понятие о фононах как о квазичастицах, имеет полный смысл.

## § 48. Волновая функция электрона, движущегося в периодическом поле

Прежде чем изучать движение системы электронов во внешнем периодическом поле решетки, мы рассмотрим движение одного электрона в поле кристаллической решетки. В следующих параграфах будет показано, как это решение может быть использовано для исследования всей системы электронов.

Для одного электрона, движущегося в кристаллической решетке, уравнение Шредингера имеет вид

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta+U\right]\psi_{эл}=E_n\psi_{эл}. \qquad (48,1)$$

В последнем уравнении потенциальная энергия $U$ является периодической функцией с периодом решетки кристалла. Она удовлетворяет условию периодичности

$$U(\boldsymbol{r}+\boldsymbol{n})=U(\boldsymbol{r}), \qquad (48,2)$$

где вектор $\boldsymbol{n}$ определен формулой (46,1). Введем оператор трансляции $\hat{T}_{\boldsymbol{n}}$, который определяется следующим образом:

$$\hat{T}_{\boldsymbol{n}}\psi(\boldsymbol{r})=\psi(\boldsymbol{r}+\boldsymbol{n}). \qquad (48,3)$$

Так как потенциальная энергия является периодической функцией, то очевидно, что оператор $\hat{T}_{\boldsymbol{n}}$ коммутирует с гамильтонианом $\hat{H}=-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta+U$. Отсюда вытекает, что волновые функции стационарных состояний можно выбрать так, чтобы они были собственными функциями обоих операторов, $\hat{H}$ и $\hat{T}_{\boldsymbol{n}}$. Последнее означает, что должны иметь место уравнения

$$\left.\begin{aligned}\hat{T}_{\boldsymbol{n}}\psi(\boldsymbol{r})&=\alpha_{\boldsymbol{n}}\psi(\boldsymbol{r}),\\ \hat{H}\psi(\boldsymbol{r})&=E_n\psi(\boldsymbol{r}).\end{aligned}\right\} \qquad (48,4)$$

Здесь $\alpha_{\boldsymbol{n}}$ — собственное значение оператора $\hat{T}_{\boldsymbol{n}}$. Легко показать, что величины $\alpha_{\boldsymbol{n}}$ по модулю равны единице. Действительно, вероятности того, что электрон будет обнаружен в точках $\boldsymbol{r}$ и $\boldsymbol{r}+\boldsymbol{n}$, должны быть одинаковыми в силу периодических свойств решетки, т. е.

$$|\psi(\boldsymbol{r}+\boldsymbol{n})|^2=|\psi(\boldsymbol{r})|^2.$$

Используя (48,4), получаем

$$|\alpha_{\boldsymbol{n}}\psi(\boldsymbol{r})|^2=|\psi(\boldsymbol{r})|^2,$$

что и доказывает наше утверждение.

Не ограничивая общности, коэффициент $\alpha_{\boldsymbol{n}}$ можно представить в виде

$$\alpha_{\boldsymbol{n}}=e^{i\boldsymbol{kn}}. \qquad (48,5)$$

По причинам, которые станут ясны из дальнейшего, $\boldsymbol{k}$ именуется эффективным волновым вектором электрона, движущегося в периодическом поле. Ниже для краткости мы будем часто именовать $\boldsymbol{k}$ просто волновым вектором.

Следовательно, для собственных функций операторов $\hat{H}$ и $\hat{T}_n$ должно в соответствии с (48,4) выполняться соотношение

$$\psi(\boldsymbol{r}+\boldsymbol{n}) = e^{i\boldsymbol{k}\boldsymbol{n}}\psi(\boldsymbol{r}). \tag{48,6}$$

В самом общем случае функцию, удовлетворяющую условию (48,6), можно записать в виде так называемых блоховских функций

$$\psi(\boldsymbol{r}) = e^{i\boldsymbol{k}\boldsymbol{r}}\, u_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r}), \tag{48,7}$$

где $u_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r})$ — периодическая функция с периодом решетки

$$u_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r}) = u_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r}+\boldsymbol{n}). \tag{48,8}$$

Подставляя в уравнение Шредингера волновую функцию $\psi$, определенную в (48,7), находим уравнение для $u_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r})$:

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}(\nabla + i\boldsymbol{k})^2 + (U - E)\right\} u_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r}) = 0. \tag{48,9}$$

Уравнение (48,9) показывает, что помимо прочих квантовых чисел, энергия электрона зависит также от волнового вектора $\boldsymbol{k}$.

Если бы мы захотели учитывать поверхностные эффекты, то нам необходимо было бы потребовать, чтобы волновая функция за пределами кристалла убывала. На больших расстояниях от кристалла она должна стремиться к нулю. Мы не будем, однако, заниматься исследованием поверхностных эффектов. Указанное же граничное условие заменим условием периодичности. Для кубического кристалла с ребром $L$ оно имеет вид $e^{ik_iL} = 1$. Это соответствует условию $\psi(x=0) = \psi(x=L)$ на плоскостях цикличности. Отсюда следует, что проекции вектора $\boldsymbol{k}_i$ принимают значения $k_i = \frac{2\pi}{L} l_i$, где $l_i$ пробегает ряд целочисленных значений. Учитывая, однако, что размеры $L$ весьма велики, можно приближенно считать $\boldsymbol{k}$ непрерывно изменяющейся величиной и при требовании цикличности.

Другой особенностью вектора $\boldsymbol{k}$ является неоднозначность его определения. Если прибавить к вектору $\boldsymbol{k}$ вектор обратной решетки $\boldsymbol{K}$, то в формуле (48,6), являющейся определением $\boldsymbol{k}$, можно записать так:

$$\psi(\boldsymbol{r}+\boldsymbol{n}) = e^{i(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{K})\boldsymbol{n}}\psi(\boldsymbol{r}) = e^{i\boldsymbol{k}\boldsymbol{n}}\psi(\boldsymbol{r}),$$

так как, в соответствии с (48,2),

$$e^{i\boldsymbol{K}\boldsymbol{n}} = 1.$$

Таким образом, замена $\boldsymbol{k}$ на $\boldsymbol{k}+\boldsymbol{K}$ не отражается на определении этого вектора. Говорят, что волновой вектор $\boldsymbol{k}$ определен с точностью до вектора обратной решетки $\boldsymbol{K}$.

Формула (48,7) показывает, что волновая функция электрона, движущегося в периодическом поле, имеет вид модулированной плоской волны, т. е. плоской волны с переменной в пространстве амплитудой $u_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r})$. Таким образом, имеется сходство между волновой функцией частицы в периодическом поле и волновой функцией свободной частицы. Это сходство оправдывает название эффективного волнового вектора $\boldsymbol{k}$. Вместе с тем необходимо подчеркнуть, что электрон, движущийся в периодическом поле, является связанной, а не свободной частицей. Его импульс не имеет определенного постоянного значения.

Мы будем часто нормировать $\psi(\boldsymbol{r})$ условием

$$\int\limits_G |\psi(\boldsymbol{r})|^2\, dV = N, \tag{48,10}$$

где интеграл берется по так называемой основной области кристалла $G$, т. е. по области, ограниченной ближайшими плоскостями цикличности; $N$ — число частиц в основной области кристалла. Если записать волновую функцию в виде

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{N}}\, e^{i\boldsymbol{k}\boldsymbol{r}}\, u_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r}), \tag{48,11}$$

то (48,10) переходит в следующее условие нормировки:

$$\int\limits_\tau |u_{\boldsymbol{k}}|^2\, dV = 1. \tag{48,12}$$

В последней формуле интегрирование проводится по элементарной ячейке.

## § 49. Энергетический спектр электрона, движущегося в периодическом поле

Выражение (48,7) для волновой функции имеет совершенно общий характер. Для того чтобы составить представление о конкретном виде функции $u_{\boldsymbol{k}}$ и энергетическом спектре $E(\boldsymbol{k})$ электрона в кристаллической решетке, необходимо сделать некоторые допущения о характере потенциальной энергии электрона в кристалле. Мы будем считать, что известна волновая функция и энергетический спектр электрона в некотором изолированном $j$-м атоме, т. е. известно решение уравнения

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + (U_j - E(n))\right\}\varphi_j = 0, \tag{49,1}$$

где $U_j$ — потенциальная энергия электрона в $j$-м атоме, $n$ — квантовое число и $E(n)$ — собственные значения энергии электрона в атоме. Если из атомов данного типа построена кристаллическая решетка, то из-за влияния на электрон полей соседних атомов его волновая функция и энергетические уровни изменяются. Мы будем, однако, считать это влияние достаточно слабым, так, чтобы:

1) можно было учитывать влияние только ближайших соседей,

2) смещение энергетических уровней, вызванное воздействием соседних атомов, было мало́ по сравнению с расстояниями между соседними уровнями энергии изолированного атома.

Полученное на основе этих допущений решение уравнения Шредингера для электрона в кристаллической решетке называется решением в приближении сильно связанных электронов.

Для характеристики электрона в кристаллической решетке, состоящей из $N$ атомов, в нулевом приближении, т. е. без учета влияния соседей, можно написать $N$ волновых функций, удовлетворяющих уравнению Шредингера (49,1) при одном и том же значении энергии. Поэтому состояние электрона является $N$-кратно вырожденным (грубо говоря, электрон может быть локализован у любого из $N$ атомов). Взаимодействие электрона с соседними атомами снимает это вырождение.

Так же, как это делается в теории возмущений вырожденных состояний, волновую функцию в нулевом приближении ищем в виде

$$\psi = \sum_j C_j \varphi_j, \tag{49,2}$$

где $C_j$ — константы, а $\varphi_j$ — решение уравнения (49,1), для $\boldsymbol{j}$-го атома. Суммирование производится по всем атомам кристалла. Под $\boldsymbol{j}$ мы понимаем радиус-вектор, идущий из начала координат к ядру $\boldsymbol{j}$-го атома.

Для простоты выкладок мы будем считать, что все электроны находятся в невырожденном $s$-состоянии.

Энергию электрона в атоме мы будем обозначать через $E(s)$. Тогда энергия электрона в кристалле будет иметь вид

$$E(\boldsymbol{k}, s) = E(s) + E^{(1)}(\boldsymbol{k}, s). \tag{49,3}$$

Она отлична от энергии электрона в атоме и зависит от волнового вектора $\boldsymbol{k}$. Подставляя волновую функцию (49,2) и энергию (49,3) в уравнение Шредингера для электрона, движущегося в кристалле, имеем

$$\sum_j C_j \Delta\varphi_j + \frac{2m}{\hbar^2}\left[E(s) + E^{(1)}(\boldsymbol{k}, s) - \sum_l U_l(\boldsymbol{r})\right]\sum_j C_j\varphi_j = 0. \tag{49,4}$$

При этом мы представили потенциальную энергию электрона в решетке $U$ в виде суммы $\sum\limits_l U_l(\boldsymbol{r})$, где $U_l(\boldsymbol{r})$ — потенциальная энергия электрона в поле $l$-го атома и суммирование ведется по всем атомам решетки.

Поскольку в уравнении (49,4) потенциальную энергию невозможно разбить на невозмущенную часть и возмущение, его решение нельзя проводить с помощью обычной теории возмущений. Нашей целью служит нахождение приближенного решения уравнения (49,4). В невозмущенном состоянии электрон считается локализованным у $j$-го атома. Малым возмущением является взаимодействие электрона с атомами решетки, ближайшими к $j$-му атому.

Выделим в потенциальной энергии электрона главное слагаемое — энергию взаимодействия с $j$-м атомом, написав

$$\sum_l U_l(\boldsymbol{r}) = \sum_l{}' U_l(\boldsymbol{r}) + U_j(\boldsymbol{r}) = U' + U_j(\boldsymbol{r}),$$

где штрих означает, что в сумме опущен член с $l = j$. Тогда можно написать:

$$\sum_j C_j\left\{\Delta\varphi_j + \frac{2m}{\hbar^2}\left[E(s) - U_j\right]\varphi_j\right\} + \sum_j\left(E^{(1)}(\boldsymbol{k},\ s) - \sum_l{}' U_l\right)C_j\varphi_j = 0.$$

В силу (49,1) фигурная скобка обращается в нуль, и мы приходим к уравнению

$$\sum_j C_j\left[E^{(1)}(\boldsymbol{k},\ s) - U'\right]\varphi_j = 0. \tag{49,5}$$

В силу сделанного нами допущения о слабом влиянии соседних атомов на электрон, «локализованный» у $j$-го атома, волновые функции $\varphi_j$ можно считать почти не перекрывающимися, т. е. полагать

$$\int \varphi_j\varphi_h^*\,dV = \begin{cases} 1 & \text{при} \quad j = h, \\ 0 & \text{при} \quad j \neq h. \end{cases}$$

Умножая (49,5) на $\varphi_h^*$ и интегрируя по объему кристалла, имеем

$$\sum_l \int \varphi_h^* C_j (E^{(1)}(\boldsymbol{k},\ s) - U')\,\varphi_j\,dV = 0.$$

Выполняя интегрирование, получаем

$$C_h\left[E^{(1)}(\boldsymbol{k},\ s) + \alpha\right] + \sum_{j \neq h} \beta(j - h)\,C_j = 0, \tag{49,6}$$

где введены следующие обозначения:

$$\left.\begin{aligned} \alpha &= -\int \varphi_h^* U' \varphi_h \, dV, \\ \beta(\boldsymbol{j}-\boldsymbol{h}) &= -\int \varphi_h^* U' \varphi_j \, dV. \end{aligned}\right\} \qquad (49,7)$$

Интеграл, входящий в $\beta$, зависит от разности $\boldsymbol{j}$ и $\boldsymbol{h}$, но не от этих величин, взятых порознь. Учитывая малую степень перекрытия волновых функций, можно в сумме величин $\beta(\boldsymbol{j}-\boldsymbol{h})$ ограничиться членами, отвечающими соседним атомам, ближайшим к $\boldsymbol{h}$-му:

$$\sum_j \beta(\boldsymbol{j}-\boldsymbol{h}) C_j = \sum_{n_1} \beta(\boldsymbol{n}_1) C_{\boldsymbol{n}_1+\boldsymbol{h}}.$$

В последней сумме число слагаемых равно числу ближайших соседей $h$-го атома. В частном случае кубической решетки ближайших соседей будет шесть. Кроме того, очевидно, что в этом случае $\beta(\boldsymbol{n}_1) = \beta(-\boldsymbol{n}_1)$.

Придавая $\boldsymbol{h}$ всевозможные значения, мы приходим, таким образом, к бесконечной системе линейных алгебраических уравнений:

$$(E^{(1)}(\boldsymbol{k}, s) + \alpha) C_h + \sum_n \beta(\boldsymbol{n}) C_{h+n} = 0. \qquad (49,8)$$

Решение этой системы будем пытаться искать в виде

$$C_h = e^{i\boldsymbol{k}\boldsymbol{h}}. \qquad (49,9)$$

Подставляя (49,9) в (49,8) и учитывая, что у атома, находящегося в кубической решетке, имеется шесть ближайших соседей, получаем

$$\begin{aligned} E^{(1)}(\boldsymbol{k}, s) &= -\alpha - \sum_n \beta(\boldsymbol{n}) e^{i\boldsymbol{k}\boldsymbol{n}} = \\ &= -\alpha - 2\beta(\cos k_x a + \cos k_y a + \cos k_z a). \end{aligned} \qquad (49,10)$$

Соответственно волновая функция имеет вид

$$\psi = \sum C_j \varphi_j = \sum e^{i\boldsymbol{k}\boldsymbol{j}} \varphi_j = e^{i\boldsymbol{k}\boldsymbol{r}} \sum e^{-i\boldsymbol{k}(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{j})} \varphi_j.$$

Для $\varphi_j$ можно по определению написать

$$\varphi_j(\boldsymbol{r}) = \varphi_s(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{j}),$$

где индекс $s$ означает, что мы рассматриваем электрон, находящийся в $s$-состоянии. Для волновой функции $\psi$ имеем

$$\psi = e^{i\boldsymbol{k}\boldsymbol{r}} \sum_j e^{-i\boldsymbol{k}(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{j})} \varphi_s(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{j}). \qquad (49,11)$$

Сравнивая с (48,7), получаем

$$u_k(r) = \sum_j e^{-ik(r-j)} \varphi_s(r-j). \tag{49,12}$$

Функция $u_k$ обладает требуемыми свойствами периодичности.

Перейдем теперь к обсуждению выражения для энергии электрона, определяемой величинами $\alpha$ и $\beta$. Заметим прежде всего, что волновая функция $\varphi_j$ электрона, локализованного у данного атома $j$, имеет узлы только в глубине атома. Вне атома она монотонно убывает. Покажем далее, что входящая в выражения $\alpha$ и $\beta$ величина $U'$ отрицательна.

Действительно, поскольку потенциальная энергия электрона в кристаллической решетке $U(r)$ и в изолированном атоме $U_j$ отрицательна (электрон связан в атоме), можно записать:

$$U' = U(r) - U_j = -|U(r)| + |U_j(r)|.$$

Ясно, что добавление к отдельному атому других атомов той же природы (притягивающих электрон), приводит к дополнительному увеличению связанности электрона в системе. Поэтому $|U(r)| > |U_j|$, что и доказывает наше утверждение. Из монотонности $\varphi_h$ и $\varphi_j$ и отрицательного знака величины $U'$ вытекает, что оба интеграла, $\alpha$ и $\beta$, определенные формулами (49,7), существенно положительны.

Итак, добавка к энергии $s$-состояния оказывается отрицательной, электрон в системе атомов связан сильнее, чем в отдельном атоме. При малых значениях $k$ можно разложить $\cos ka$ в ряд и написать

$$E(k, s) = E(s) - \alpha - 6\beta + \beta a^2 k^2 = E_{\min} + \frac{1}{2}\left(\frac{\partial^2 E}{\partial k^2}\right) k^2 = E_{\min} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}, \tag{49,13}$$

где $E_{\min}$ — постоянная, не зависящая от $k$ величина, отвечающая минимальному значению энергии

$$E_{\min} = E(s) - \alpha - 6\beta,$$

а $m^*$ равно

$$m^* = \frac{\hbar^2}{2\beta a^2} \frac{1}{\left(\frac{\partial^2 E}{\partial k^2}\right)}. \tag{49,14}$$

Формула (49,13) показывает, что при малых $k$ зависимость энергии электрона от $k$ имеет такой же вид, как у свободной частицы. При этом роль массы играет эффективная масса $m^*$, а величину $p = \hbar k$ естественно назвать импульсом частицы. Однако следует иметь в виду, что $p$ является не реальным, а эффективным импульсом. Это видно из того факта, что вектор $k$, а с ним и вектор $p$, определены лишь с точностью до

вектора обратной решетки. Поэтому величину $\boldsymbol{p}$ именуют квазиимпульсом. Подобно тому как у свободной частицы имеет место закон сохранения импульса, у связанной частицы, находящейся в периодическом поле кристалла, сохраняется постоянное значение квазиимпульса.

При больших значениях $\boldsymbol{k}$ разложение (49,13) теряет силу. При выполнении равенств

$$k_x a = \pi, \qquad k_y a = \pi, \qquad k_z a = \pi$$

$\cos k_i a = -1$ и энергия электрона принимает максимальное значение:

$$E\left(\frac{\pi}{a};\ \frac{\pi}{a};\ \frac{\pi}{a};\ s\right) = E_{\max}.$$

Ход энергии $E(\boldsymbol{k}, s)$ схематически изображен на рис. 42. Поскольку $E(\boldsymbol{k}, s)$ зависит от трех переменных, на рис. 42 представлена зависимость энергии от $k_x$ при фиксированных значениях $k_y$ и $k_z$.

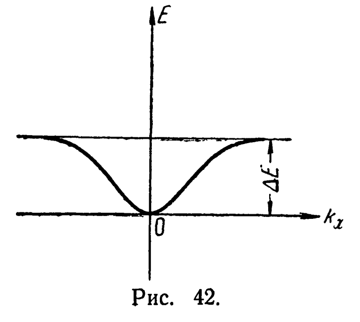


Рис. 42.

Мы видим, что из дискретного уровня энергии, отвечающего $s$-состоянию электрона в атоме, в кристалле возникает полоса дозволенных значений энергии. Подчеркнем, что причиной, обусловливающей образование полосы дозволенных энергий, является взаимодействие электрона, «локализованного» у данного атома с полем других атомов решетки. Это взаимодействие снимает вырождение, которое существует в системе из $N$ атомов и одного электрона. Поскольку электрон может быть локализован у любого из атомов, кратность вырождения весьма высока и вырожденный уровень энергии благодаря указанному взаимодействию расщепляется на множество подуровней. В том приближении, в котором волновой вектор можно считать пробегающим непрерывный ряд значений (ср. § 48), совокупность подуровней можно рассматривать как непрерывную полосу дозволенных значений энергии.

Полоса дозволенных энергий, возникающая из основного уровня энергии атома, именуется нижней энергетической зоной. Ширина нижней энергетической зоны равна $\Delta E = E_{\max} - E_{\min} = 12\beta$. Точно такой же расчет может быть проведен для состояний, возникающих из первого возбужденного состояния электрона в изолированном атоме. Будем считать его $p$-состоянием. Энергия электрона $E(\boldsymbol{k}, p)$ при этом дается формулой того же типа, что и $E(\boldsymbol{k}, s)$. Однако оказывается[1]), что один из интегра-

[1]) См А. Вильсон, Квантовая теория металлов, Гостехиздат, 1941, стр. 47.

лов перекрытия [интегралы (49,7)] отрицателен, а два других положительны.

Таким образом, из уровня энергии, отвечающего $p$-состоянию, в изолированном атоме возникает первая возбужденная энергетическая зона электрона, движущегося в кристаллической решетке. Последующие энергетические уровни изолированного атома превращаются в соответствующие зоны в кристалле.

Условием количественной применимости приведенного расчета служит, в полном согласии с допущением 2) (в начале параграфа) требование, чтобы ширина зон была мала по сравнению с расстоянием между уровнями энергии в невозмущенном атоме. Поскольку ширина зон определяется интегралами типа (49,7), это требование эквивалентно малому перекрыванию волновых функций электрона в соседних атомах.

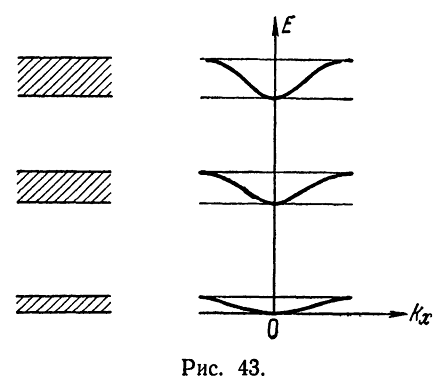


Рис. 43.

Энергетический спектр в приближении сильно связанного электрона в кристалле имеет характер сравнительно узких полос дозволенных энергий, разделенных широкими полосами запрещенных энергий (рис. 43). Фактически это приближение имеет место для сравнительно глубоких атомных электронов. У внешних электронов волновые функции соседних атомов перекрываются настолько сильно, что приближение сильно связанных электронов теряет смысл. Иными словами, вероятность нахождения электрона вблизи любой точки в решетке кристалла имеет почти одинаковое значение.

В этом случае вновь оказывается возможным провести расчет энергетического спектра электрона в приближении, именуемом приближением квазисвободных электронов. Именно, в нулевом приближении не будем вовсе учитывать влияние периодического поля кристаллической решетки и будем считать электрон свободным. Его волновая функция, нормированная на единицу, и энергия имеют вид

$$\psi_0 = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\boldsymbol{kr}}, \qquad E^0(\boldsymbol{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}.$$

Здесь невозмущенные состояния обычно вырождены. Это особенно легко заметитть на примере кубического кристалла. В самом деле, в соответствии с ранее изложенным (см. § 48),

проекции вектора $k_x, k_y, k_z$ могут принимать следующие значения:

$$k_i = \frac{2\pi}{a} l_i,$$

где $l_i$ принимает целочисленные значения.

Таким образом, если имеется вектор $\boldsymbol{k}$, направленный по оси $x$ и равный $\frac{2\pi}{a} l_0$, где $l_0$ — некоторое целое число, то существует также ряд других векторов, имеющих тот же модуль, но различающихся своим направлением. Для нахождения возмущенной волновой функции мы должны воспользоваться теорией возмущений для вырожденных состояний. Положим

$$\psi = \sum_{\boldsymbol{k}} C_{\boldsymbol{k}} \frac{e^{i\boldsymbol{kr}}}{\sqrt{V}}, \tag{49,15}$$

где суммирование производится по всем векторам $\boldsymbol{k}$, концы которых лежат на сфере $|\boldsymbol{k}| = \text{const}$. Для определения поправки к энергии в первом порядке по теории возмущений, согласно формуле (54,4), имеем

$$| U_{\boldsymbol{k}, \boldsymbol{k}'} - E^{(1)} \delta_{\boldsymbol{k}, \boldsymbol{k}'} | = 0, \tag{49,16}$$

где матричный элемент $U_{\boldsymbol{k}, \boldsymbol{k}'}$ равен

$$U_{\boldsymbol{k}, \boldsymbol{k}'} = \frac{1}{V} \int e^{i(\boldsymbol{k}'-\boldsymbol{k})\boldsymbol{r}} U(\boldsymbol{r})\, dV.$$

Предположим вначале, что среди векторов $\boldsymbol{k}$, по которым ведется суммирование в (49,15) и концы которых лежат на поверхности сферы $|\boldsymbol{k}| = \text{const}$, нет векторов, удовлетворяющих соотношению

$$\boldsymbol{k}' - \boldsymbol{k} = \boldsymbol{K}. \tag{49,17}$$

В этом случае все интегралы $U_{\boldsymbol{k} \boldsymbol{k}'}$ малы, кроме диагонального матричного элемента $U_{\boldsymbol{k}, \boldsymbol{k}}$. Это можно показать следующим образом. Матричный элемент

$$U_{\boldsymbol{k}, \boldsymbol{k}'} = \frac{1}{V} \int U e^{i(\boldsymbol{k}'-\boldsymbol{k})\boldsymbol{r}}\, dV$$

определяется интегрированием по всему пространству кристалла. Удобно перейти к интегрированию по элементарной ячейке

$$U_{\boldsymbol{k}, \boldsymbol{k}'} = \frac{1}{V} \sum_{\text{по ячейкам}} \int_{\tau_n} U e^{i(\boldsymbol{k}'-\boldsymbol{k})\boldsymbol{r}}\, dV.$$

Интеграл по $\boldsymbol{n}$-й элементарной ячейке следует преобразовать, введя переменные

$$\boldsymbol{r} = \boldsymbol{n} + \boldsymbol{r}',$$

где $\boldsymbol{n}$ — вектор, направленный из начала координат в $n$-й атом ячейки. Тогда мы получим

$$\int\limits_{\tau_n} U(\boldsymbol{r})\, e^{i(\boldsymbol{k}'-\boldsymbol{k})\boldsymbol{r}}\, dV = e^{i(\boldsymbol{k}'-\boldsymbol{k})\boldsymbol{n}} \int\limits_{\tau_n} e^{i(\boldsymbol{k}'-\boldsymbol{k})\boldsymbol{r}'} U(\boldsymbol{r}'+\boldsymbol{n})\, dV'.$$

Используя свойства периодичности функции $U$, найдем, что правая часть последнего равенства имеет вид

$$e^{i(\boldsymbol{k}'-\boldsymbol{k})\boldsymbol{n}} \int\limits_{\tau_0} U(\boldsymbol{r}')\, e^{i(\boldsymbol{k}'-\boldsymbol{k})\boldsymbol{r}'}\, dV'.$$

Для матричного элемента $U_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}'}$ имеем:

$$U_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}'} = \frac{1}{V} \sum_n e^{i(\boldsymbol{k}'-\boldsymbol{k})\boldsymbol{n}} \int\limits_{\tau_0} U(\boldsymbol{r})\, e^{i(\boldsymbol{k}'-\boldsymbol{k})\boldsymbol{r}}\, dV =$$

$$= \frac{1}{V} \int\limits_{\tau_0} U(\boldsymbol{r})\, e^{i(\boldsymbol{k}'-\boldsymbol{k})\boldsymbol{r}} dV \sum_n e^{i(\boldsymbol{k}'-\boldsymbol{k})\boldsymbol{n}}. \qquad (49,18)$$

В последней формуле интегрирование производится по элементарной ячейке, а суммирование — по всем узлам решетки.

Сумма $B = \sum\limits_n e^{i(\boldsymbol{k}'-\boldsymbol{k})\boldsymbol{n}}$ при произвольных $\boldsymbol{k}' - \boldsymbol{k}$ обладает следующим свойством. Она равна

$$B = \sum_n e^{i(\boldsymbol{k}'-\boldsymbol{k})\boldsymbol{n}} = \begin{cases} N, & \text{если } \boldsymbol{k}'-\boldsymbol{k} = \boldsymbol{K}, \\ 0, & \text{если } \boldsymbol{k}'-\boldsymbol{k} \neq \boldsymbol{K}, \end{cases} \qquad (49,19)$$

где $N$ — число узлов в решетке.

Верхнее равенство (49,19) получается сразу после использования формулы (46,2). Нижнее соотношение можно получить, если сделать замену $\boldsymbol{n}$ на $\boldsymbol{n}+\boldsymbol{\alpha}$, где $\boldsymbol{\alpha}$ — любой вектор решетки. При больших значениях $N$ величина $B$ при этой подстановке изменяться не может, так как такая замена эквивалентна смещению всех узлов решетки

$$B = e^{i(\boldsymbol{k}'-\boldsymbol{k})\boldsymbol{\alpha}} \sum_n e^{i(\boldsymbol{k}'-\boldsymbol{k})\boldsymbol{n}} = \sum_n e^{i(\boldsymbol{k}'-\boldsymbol{k})\boldsymbol{n}}.$$

Если $\boldsymbol{k}' - \boldsymbol{k} \neq \boldsymbol{K}$, то очевидно, что $B = 0$.

Мы видим теперь, что единственный отличный от нуля диагональный матричный элемент в (49,16) равен

$$U_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}} = \frac{1}{V} \int U(r)\, dV = \overline{U}.$$

Величина $\overline{U}$ представляет собой средний потенциал в пространстве решетки.

Раскрытие детерминанта (49,16) и решение уравнения приводит к единственному корню $E^{(1)}=\overline{U}$. В соответствии с уравнением (54,4) ч. V, коэффициенты $C_{k}$ могут быть выбраны следующим образом:

$$1)\ C_{k_1}=1,\quad C_{k_2}=C_{k_3}=\ \dots\ =0,$$

$$2)\ C_{k_2}=1,\quad C_{k_1}=C_{k_3}=\ \dots\ =0\ \text{и т. д.}$$

Мы можем теперь написать выражения для волновой функции и энергии. Они имеют вид

$$\psi_0(\boldsymbol{k})=\frac{1}{\sqrt{V}}e^{i\boldsymbol{kr}},\qquad E(\boldsymbol{k})=E^0(\boldsymbol{k})+U_{\boldsymbol{kk}}=E^0(\boldsymbol{k})+\overline{U}.$$

Найденные формулы совпадают по форме с результатами, которые могли бы быть получены, если бы при указанном расчете мы сразу пользовались теорией возмущений без вырождения. Это происходит потому, что решением уравнения (49,16) является единственный корень $E^{(1)}=\overline{U}$.

Можно получить поправку во втором приближении. Воспользуемся обычным выражением теории возмущений без вырождения:

$$E(\boldsymbol{k})=E^0(\boldsymbol{k})+\overline{U}+\sum_{\boldsymbol{k}'}{}' \frac{|U_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}'}|^2}{E_{\boldsymbol{k}}-E_{\boldsymbol{k}'}}. \tag{49,20}$$

В соответствии с (49,18) и (49,19), матричные элементы отличны от нуля только при

$$\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}'=\boldsymbol{K}.$$

Выражение (49,20) можно записать теперь в виде

$$E(\boldsymbol{k})=E^0(\boldsymbol{k})+\overline{U}-\sum_{\boldsymbol{K}}\frac{|U_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}+\boldsymbol{K}}|^{|}}{\frac{\hbar^2}{2m}(\boldsymbol{K}^2-2\boldsymbol{k}\boldsymbol{X})}. \tag{49,21}$$

Третий член в формуле (49,21) является малой поправкой, так что расстояние между ближайшими уровнями определяется практически формулой для свободных электронов. Если, однако, в одном из членов суммы в формуле (49,21) знаменатель обращается в нуль, т. е. если при некотором $\boldsymbol{K}$ имеет место равенство

$$k'^2-k^2=\boldsymbol{K}^2-2\boldsymbol{kK}=0, \tag{49,22}$$

то эта формула теряет смысл. Поправка к энергии $E(\boldsymbol{k})$ оказывается не малой, и использование теории возмущений недопустимо. Наличие больших слагаемых в (49,21) позволяет предполагать существование больших расстояний между соседними уровнями.

Соотношение (49,22) означает, что для некоторых векторов $\boldsymbol{k}$ и $\boldsymbol{k}'$ выполнено равенство

$$\left.\begin{aligned} \boldsymbol{k}' - \boldsymbol{k} &= \boldsymbol{K}, \\ |\boldsymbol{k}'| &= |\boldsymbol{k}|. \end{aligned}\right\} \qquad (49,22')$$

Допустим, что это равенство имеет место только при одном значении $\boldsymbol{K}$, т. е. при определенном значении $\boldsymbol{k}$ и $\boldsymbol{k}'$. Это значит, что состояния электрона имеют почти равные энергии $E(\boldsymbol{k})$ и $E(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{K})$, т. е. являются двукратно вырожденными. В этом случае для нахождения поправки к энергии следует воспользоваться теорией возмущений для двукратно вырожденных уровней.

Таким образом, уравнение (49,16) запишется теперь в виде

$$\begin{vmatrix} \overline{U} - E^{(1)}, & U_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}'} \\ U_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}'}, & \overline{U} - E^{(1)} \end{vmatrix} = 0. \qquad (49,23)$$

Раскрывая детерминант и решая уравнение, мы найдем для поправки к энергии:

$$E^{(1)} = \overline{U} \pm U_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}'}.$$

Это означает, что энергия претерпевает разрыв и что расстояние между соседними уровнями равно $2|U_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}'}|$. Очевидно, что разрыв энергии происходит при одновременном выполнении равенств (49,22''). Формулы (49,22'') выражают хорошо известные условия отражения Брэгга. Они выделяют в кристалле определенное направление избирательного (селективного) отражения падающих на него лучей. Действительно, умножая верхнее равенство (49,22'') на векторы решетки $\boldsymbol{a}$, $\boldsymbol{b}$, $\boldsymbol{c}$, мы убеждаемся в тождественности формул (49,22'') и (36,18) ч. IV.

Таким образом, в приближении квазисвободных электронов энергия как функция волнового вектора для кубического кристалла имеет следующий ход: с ростом $\boldsymbol{k}$ она увеличивается по закону (49,21). Когда $\boldsymbol{k}$ достигает значения $k_x = k_y = k_z = \pm\frac{\pi}{a}$, возникает брэгговское отражение. Энергия претерпевает разрыв, причем ширина запрещенной зоны равна $2\overline{U}$. После этого энергия вновь выражается формулой (49,21). При $k_x = k_y = k_z = \pm\frac{2\pi}{a}$ энергия вновь претерпевает разрыв и т. д.

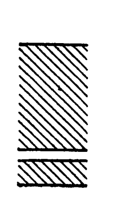
На рис. 44 схематически изображен энергетический спектр квазисвободного электрона.

Качественная картина энергетического спектра квазисвободного и сильно связанного электрона совпадают. Различие заключается в том, что в первом случае получаются широкие дозволенные зоны и узкие полосы недозволенных энергий, во втором

случае, наоборот, узкие дозволенные зоны и широкие полосы запрещенных энергий. В реальных кристаллах реализуются как предельные случаи сильно связанных и квазисвободных электронов, так и вся гамма промежуточных случаев. Однако во всех случаях энергетический спектр электрона в кристалле имеет характер зон дозволенных значений энергий, разделенных областями запрещенных значений энергии.

Количественный расчет формы зависимости $E(\boldsymbol{k})$ для реальных кристаллов является сложной задачей. Разработан ряд приближенных методов расчета зон, изложение которых может быть найдено в специальной литературе.

В следующем параграфе нами будет показано, что общий результат, полученный в одночастичной модели, т. е. для случая движения одного электрона в кристаллической решетке, остается в силе и в кристалле, содержащем большое число электронов. Таким образом, энергетический спектр электронов в реальных кристаллах имеет зонный характер.



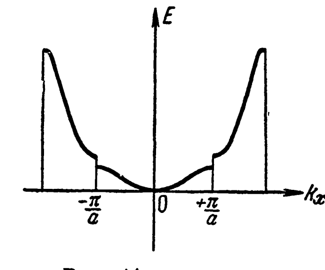



Рис. 44.

Рассматривая движение электронов в периодическом поле, мы пренебрегали собственными размерами ионов, считая их узлами кристаллической решетки.

На первый взгляд кажется удивительным, что такое грубое приближение и вытекающая из него модель квазисвободных электронов является хорошим приближением к действительности.

Размеры ионов не очень малы по сравнению с расстояниями между ионами. Обычно радиус иона составляет около половины атомного радиуса.

В области пространства, занятой ионом, волновая функция электрона должна вести себя подобно волновой функции внутри атома. Электрон внутри атома имеет большую кинетическую энергию и соответственно малую длину волны. Поэтому его волновая функция испытывает осцилляции. Очевидно, что такое поведение волновой функции значительно отличается от плавного хода волновой функции квазисвободного электрона. Оказывается, однако, что если мы хотим описывать поведение волновой функции электрона в области вне иона и не интересуемся детальным ходом ее во всем пространстве, можно воспользоваться методом, подобным тому, который применяется в теории рассеяния при малых энергиях. Мы видели в § 93 ч. V, что

в этом случае поведение частицы вне области, где ее потенциал велик (вне ядра или атома), не зависит от ее поведения внутри этой области. Поэтому истинную волновую функцию, являющуюся решением уравнения Шредингера

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U\right)\psi = E\psi,$$

можно заменить фиктивной волновой функцией $\varphi$, удовлетворяющей уравнению

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U_{ps}\right)\varphi = E\varphi$$

с той же энергией и с измененной потенциальной энергией. Оператор $U_{ps}$ носит название псевдопотенциала. Если построить $U_{ps}$ так, чтобы вне области $r < R$ он совпадал с

$$U_{ps} = U \quad \text{при} \quad r \geqslant R,$$

то вне иона функции $\psi$ и $\varphi$ удовлетворяют одному и тому же уравнению Шредингера. Подбирая соответствующим образом псевдопотенциал $U_{ps}$, можно добиться того, чтобы фиктивная волновая функция $\varphi$ плавно экстраполировалась в область $r < R$.

Сглаженная волновая функция $\varphi$ будет описывать движение электрона в кристалле.

Вне ионных остатков она совпадает с $\psi$, а действие на $\varphi$ поля в области $r < R$ является слабым возмущением.

Выбор псевдопотенциала не является вполне однозначной процедурой. Соответственно и $\varphi$ могут иметь несколько различный вид.

Часто для $\varphi$ пользуются выражением

$$\varphi = \sum a_k e^{ikr} - \sum b_{k'} \Phi_{k'}(\boldsymbol{r}), \tag{49,24}$$

где $\Phi_{k'}(\boldsymbol{r})$ — функции для внутренних состояний электрона в атоме. Эти функции сильно локализованы и при $r > R$ фактически обращаются в нуль. Поэтому здесь $\varphi$ совпадает с волновой функцией квазисвободной частицы. Коэффициенты можно подобрать из условия ортогональности $\varphi$ и $\Phi_{k'}$.

Подставляя (49,24) в уравнение Шредингера, можно затем подобрать выражение для псевдопотенциала $U_{ps}$.

В свете сказанного становится ясным, почему поведение электронов в решетке достаточно успешно описывается моделью квазисвободных электронов.

В тех случаях, когда речь идет о свойствах электронов, связанных с их движением по кристаллу как целому, поведение электронов можно описывать фиктивной волновой функцией $\varphi$.

На эту функцию в областях $r < R$ действует лишь слабое поле, тогда как при $r \geq R$ она совпадает с истинной волновой функцией.

В целом $\varphi$ обнаруживает плавный ход, изменяясь на расстояниях порядка постоянной решетки, как это и должно быть для квазисвободных частиц.

Движение электрона по решетке металла и полупроводника можно характеризовать его средней (групповой) скоростью, которая может быть найдена по общей формуле

$$\bar{v} = \frac{d\omega}{d\boldsymbol{k}} = \frac{\partial E(\boldsymbol{k})}{\partial(\hbar\boldsymbol{k})}.$$

Если подставить вместо $E(\boldsymbol{k})$ энергию квазисвободного электрона, то мы приходим к формуле

$$\bar{v}_x = \frac{\hbar k_x}{m}.$$

В случае сильно связанного электрона средняя скорость имеет вид

$$\bar{v}_x = \frac{2\beta a}{\hbar} \sin k_x a.$$

Мы видим, что средняя скорость электрона отлична от нуля в обоих случаях. При этом сильно связанный электрон движется с тем меньшей средней скоростью, чем меньше $\beta$, т. е. чем меньше ширина зоны.

Предположим теперь, что кристалл помещен во внешнее электрическое поле напряженностью $\mathcal{E}$. Энергия электрона в кристалле будет равна

$$E = E(\boldsymbol{k}) - e\mathcal{E}\boldsymbol{r}.$$

Среднее ускорение электрона

$$\bar{\dot{\boldsymbol{p}}} = -\frac{\partial E}{\partial \boldsymbol{r}} = e\mathcal{E}$$

оказывается совпадающим с ускорением свободной частицы. Смысл этого результата легко понять, если составить выражение для баланса энергии. Средняя работа поля над электроном равна

$$\overline{ev\mathcal{E}} = \frac{e}{\hbar}\frac{\partial E}{\partial k}\mathcal{E}.$$

С другой стороны, эта же работа идет только на увеличение энергии электрона

$$\frac{dE}{dt} = \frac{\partial E(\boldsymbol{k})}{\partial \boldsymbol{k}}\frac{d\boldsymbol{k}}{dt}.$$

Приравнивая оба выражения для работы, приходим к выражению

$$\frac{d\boldsymbol{k}}{dt} = \frac{e}{\hbar}\mathcal{E}.$$

При этом мы считаем, что увеличение энергии электрона проис-

ходит в пределах данной зоны. Отсутствие у электрона потерь энергии приводит к разгону его полем. Иными словами, электрон движется по идеальной решетке без всякого сопротивления. В § 61—62 будет показано, что основным источником сопротивления служат тепловые колебания решетки, нарушающие регулярность расположения атомов в ее узлах.

## § 50. Система электронов в твердом теле[1])

Мы можем теперь перейти к обсуждению свойств системы электронов в твердом теле. Число не локализованных электронов, движущихся по всему объему кристалла, может варьировать в весьма широких пределах от 0,1 до 1 на один атом.

При таких высоких плотностях критерий вырождения электронного газа [см. (2,36′)]

$$\frac{V}{N}\frac{(2\pi mkT)^{3/2}}{(2\pi\hbar)^3} \ll 1$$

оказывается выполненным вплоть до температур порядка 4—5 тысяч градусов. Это означает, что при такой высокой плотности электроны всегда образуют вырожденный ферми-газ.

Если, однако, обратиться к сравнению кинетической энергии вырожденного ферми-газа с его энергией кулоновского взаимодействия, то, как показано в § 79 ч. III, это отношение

$$\frac{\varepsilon_{\max}}{\left(\frac{e^2}{r}\right)} = \frac{h^2}{2m}\left(\frac{3}{8\pi}\frac{N}{V}\right)^{2/3} : \frac{e^2}{\left(\frac{V}{N}\right)^{1/3}} \simeq \left(\frac{N}{V}\right)^{1/3}\left(\frac{h^2}{e^2 m}\right) \sim 1$$

при

$$\frac{N}{V} \sim 10^{23}.$$

Таким образом, кулоновское взаимодействие между электронами в металле является сильным и следовало было бы говорить об электронной жидкости, а не об электронном газе, заполняющем металл. Однако, поскольку эта жидкость образована электронами, движущимися на фоне положительно заряженных ионов, в действительности еще правильнее говорить о плазме, заполняющей объем твердого тела. Важнейшим отличием плазмы твердого тела от газовой плазмы является то, что она является вырожденной и квантовые эффекты в ней играют важную роль. Тем не менее, как мы сейчас в этом убедимся, важнейшие свойства квантовой вырожденной и классической плазмы оказываются близкими. Это по крайней мере относится к свойствам экранировки и существованию плазменных волн. Чтобы не

---

[1]) См. Д. Займан, Принципы теории твердого тела, «Мир», 1966.

усложнять выкладок, мы ограничимся приближением, в котором заряд положительных ионов можно считать равномерно «размазанным» по всему кристаллу и образующим положительный фон. Учет дискретного распределения положительных зарядов не вносит существенного изменения в получающийся результат.

Рассмотрим систему свободных электронов с функцией распределения $f(\varepsilon)$ и положительный фон в некотором объеме, на который действует внешнее переменное поле. Будем считать, что приложенное внешнее поле создает в системе потенциал

$$\varphi = \lim_{\delta \to 0} \int \int \varphi(\boldsymbol{q}, \omega) e^{i(\boldsymbol{q}\boldsymbol{r} - \omega t)} e^{\delta t} \, d\boldsymbol{q} \, d\omega. \tag{50,1}$$

Здесь $\varphi(\boldsymbol{q}, \omega)$ представляет компоненту Фурье. Множитель $e^{\delta t}$ означает, что поле адиабатически (медленно) включается за промежуток времени от $t \to -\infty$ до $t = 0$. При таком включении поля оно не будет вызывать в системе переходов вплоть до момента $t = 0$. При $t > 0$ в системе будут происходить переходы или, иными словами, возникает отклик на приложенное возмущение. Этот отклик удобно характеризовать диэлектрической проницаемостью $\varepsilon(\boldsymbol{q}, \omega)$[1]. Для вычисления $\varepsilon(\boldsymbol{q}, \omega)$ удобно выразить ее через плотность заряда, индуцируемого в системе внешним полем. Пользуясь формулой (31,12) ч. IV и очевидными выражениями для закона Ома и уравнения непрерывности в фурье-компонентах

$$\boldsymbol{j}(\boldsymbol{q}, \omega) = \sigma(\boldsymbol{q}, \omega) \boldsymbol{E}(\boldsymbol{q}, \omega), \qquad i\boldsymbol{q}\boldsymbol{j}(\boldsymbol{q}, \omega) = i\omega\rho(\boldsymbol{q}, \omega),$$

и соотношением

$$\boldsymbol{E}(q, \omega) = -i\boldsymbol{q}\varphi(\boldsymbol{q}, \omega),$$

где $\varphi(\boldsymbol{q}, \omega)$ — фурье-компонента скалярного потенциала, получаем

$$\varepsilon(\boldsymbol{q}, \omega) = 1 + \frac{4\pi i \sigma(\boldsymbol{q}, \omega)}{\omega} = $$

$$= 1 + \frac{4\pi i \boldsymbol{j}\boldsymbol{E}}{\omega E^2} = 1 + \frac{4\pi i}{q^2} \frac{\boldsymbol{q}\boldsymbol{E}}{E^2} \rho(\boldsymbol{q}, \omega) = 1 - \frac{4\pi\rho(\boldsymbol{q}, \omega)}{q^2 \varphi(\boldsymbol{q}, \omega)}. \tag{50,2}$$

Дальнейшая задача заключается в вычислении фурье-компоненты плотности заряда $\rho(\boldsymbol{q}, \omega)$.

С этой целью рассмотрим свободный электрон, находящийся в начальном состоянии с волновым вектором $\boldsymbol{k}$ и энергией $\varepsilon(\boldsymbol{k})$.

Волновая функция электрона в невозмущенном состоянии может быть написана в виде

$$\psi_{\boldsymbol{k}} = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\boldsymbol{k}\boldsymbol{r}} e^{\frac{i\varepsilon(\boldsymbol{k}) t}{\hbar}}.$$

---

[1]) Не смешивать $\varepsilon(\boldsymbol{q}, \omega)$ с энергией электрона $\varepsilon(\boldsymbol{k})$.

Рассмотрим возмущение, создаваемое внешним полем с частотой $\omega$, т. е. положим, что возмущенный гамильтониан имеет вид

$$\hat{H}' = \lim_{\delta \to 0} e\varphi(\boldsymbol{q}, \omega)(e^{\delta t} e^{i(\boldsymbol{q}\boldsymbol{r} - \omega t)} + e^{i(\boldsymbol{q}\boldsymbol{r}+\omega t)}).$$

При таком включении поля оно не будет вызывать в системе переходов во все времена вплоть до $t = 0$. При $t > 0$ под влиянием возмущения свободный электрон приобретает волновую функцию

$$\psi(t) = \psi_{\boldsymbol{k}} + c_1(t)\, \psi_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}} + c_2(t)\, \psi_{\boldsymbol{k}-\boldsymbol{q}}. \tag{50,3}$$

В первом порядке теории возмущений (ср. § 55 ч. V) для $c_1$ и $c_2$ имеем

$$c_1(t) = \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^{t} (\hat{H}')^*_{\boldsymbol{k},\, \boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}}\, e^{\frac{i}{\hbar}\{\varepsilon(\boldsymbol{k}) - \varepsilon(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q})\}\, t}\, dt.$$

Матричный элемент берется по не зависящим от времени волновым функциям. Он равен

$$(\hat{H}')^*_{\boldsymbol{k},\, \boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}} = \\ = e\varphi(\boldsymbol{q}, \omega)\left[\int e^{-i(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q})\boldsymbol{r}} e^{i(\boldsymbol{q}\boldsymbol{r}-\omega t)} e^{i\boldsymbol{q}\boldsymbol{r}}\, dV + \ldots\right] = e\varphi(\boldsymbol{q}, \omega)\, e^{+i\omega t}.$$

Аналогично

$$(H')_{\boldsymbol{k},\, \boldsymbol{k}-\boldsymbol{q}} = e\varphi(\boldsymbol{q}, \omega)\, e^{-i\omega t}.$$

Таким образом,

$$c_1(t) = \frac{e\varphi(\boldsymbol{q}, \omega)}{i\hbar}\left\{\int_{-\infty}^{t} e^{\delta t} e^{\frac{i}{\hbar}\{\varepsilon(\boldsymbol{k}) - \varepsilon(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}) + \hbar\omega\}\, t}\, dt\right\}.$$

Множитель $e^{\delta t}$ обеспечивает сходимость интегралов на нижнем пределе. Выполняя интегрирование, и переходя затем к пределу $\delta \to 0$, находим окончательно для $c_1(t)$

$$c_1(t) = -\frac{e\varphi(\boldsymbol{q}, \omega)\, e^{\frac{i}{\hbar}\{\varepsilon(\boldsymbol{k}) - \varepsilon(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}) + \hbar\omega\}\, t}}{\varepsilon(\boldsymbol{k}) - \varepsilon(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}) + \hbar\omega}. \tag{50,4}$$

Аналогично,

$$c_2(t) = -\frac{e\varphi(\boldsymbol{q}, \omega)\, e^{\frac{i}{\hbar}\{\varepsilon(\boldsymbol{k}) - \varepsilon(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{q}) - \hbar\omega\}\, t}}{\varepsilon(\boldsymbol{k}) - \varepsilon(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{q}) - \hbar\omega}. \tag{50,5}$$

Найдем теперь электронную плотность в системе свободных электронов, индуцированную возмущением. Очевидно, что для одного электрона можно написать индуцированную плотность заряда в виде

$$\delta\rho = \{|\psi(t)|^2 - |\psi_{\boldsymbol{k}}|^2\} \cong \\ \cong e\{c_1^* \psi^*_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}} \psi_{\boldsymbol{k}} + c_2^* \psi^*_{\boldsymbol{k}-\boldsymbol{q}} \psi_{\boldsymbol{k}} + c_1 \psi_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}} \psi^*_{\boldsymbol{k}} + c_2 \psi_{\boldsymbol{k}-\boldsymbol{q}} \psi^*_{\boldsymbol{k}}\}.$$

При этом мы опустили члены второго порядка малости $c_1^2$ и $c_2^2$. Подставляя значения $c_1$ и $c_2$ из (50,4) и (50,5), находим

$$\delta\rho = e^2\varphi(\boldsymbol{q},\ \omega)\left(e^{-i(\boldsymbol{qr}+\omega t)} + e^{-i(\boldsymbol{qr}-\omega t)}\right) \times$$
$$\times\left(\frac{1}{\varepsilon(\boldsymbol{k}) - \varepsilon(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}) + \hbar\omega} + \frac{1}{\varepsilon(\boldsymbol{k}) - \varepsilon(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{q}) - \hbar\omega}\right). \quad (50,6)$$

Полная плотность заряда, индуцированного в системе электронов внешним полем, равна

$$\bar\rho(\boldsymbol{q},\ \omega) = \int \delta\rho f(\boldsymbol{k})\, d\boldsymbol{k} = -e^2\varphi(\boldsymbol{q}, \omega)\left(e^{i(\boldsymbol{qr}-\omega t)} + e^{i(\boldsymbol{qr}+\omega t)}\right)\times$$
$$\times\left\{\frac{f(\boldsymbol{k})\, d\boldsymbol{k}}{\varepsilon(\boldsymbol{k}) - \varepsilon(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}) + \hbar\omega} + \int \frac{f(\boldsymbol{k})\, d\boldsymbol{k}}{\varepsilon(\boldsymbol{k}) - \varepsilon(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{q}) - \hbar\omega}\right\} =$$
$$= -e^2\varphi(\boldsymbol{q},\ \omega)\left(e^{i(\boldsymbol{qr}-\omega t)} + \text{сопр.}\right)\times$$
$$\times\left[\int \frac{f(\boldsymbol{k})\, d\boldsymbol{k}}{\varepsilon(\boldsymbol{k}) - \varepsilon(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}) + \hbar\omega} + \int \frac{f(\boldsymbol{k}'+\boldsymbol{q})\, d\boldsymbol{k}'}{\varepsilon(\boldsymbol{k}'+\boldsymbol{q}) - \varepsilon(\boldsymbol{k}) - \hbar\omega}\right] =$$
$$= -e^2\varphi(\boldsymbol{q},\ \omega)\cdot\left(e^{i(\boldsymbol{qr}-\omega t)} + e^{i(\boldsymbol{qr}+\omega t)}\right)\int \frac{f(\boldsymbol{k}) - f(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q})}{\varepsilon(\boldsymbol{k}) - \varepsilon(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}) + \hbar\omega}\, d\boldsymbol{k}. \quad (50,7)$$

При этом мы во втором интеграле произвели замену переменных $\boldsymbol{k} \to \boldsymbol{k}' + \boldsymbol{q}'$ и затем $\boldsymbol{k}' \to \boldsymbol{k}$. Подставляя это значение $\bar\rho$ в (50,2), находим

$$\varepsilon(\boldsymbol{q},\ \omega) = 1 + \frac{4\pi e^2}{q^2}\int \frac{f(\boldsymbol{k}) - f(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q})}{\varepsilon(\boldsymbol{k}) - \varepsilon(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}) + \hbar\omega}\, d\boldsymbol{k}. \quad (50,8)$$

Диэлектрическая проницаемость представляет основную характеристику вещества. Пользуясь формулой (50,8), можно найти реакцию системы на произвольное возмущение плазмы.

Исследуем предельные случаи $\omega \to 0$ (постоянное поле) и $\hbar\omega \gg E(\boldsymbol{k}) - E(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q})$ (высокочастотное поле). При $\omega \to 0$

$$\varepsilon(\boldsymbol{q},\ 0) \cong 1 + \frac{4\pi e^2}{q^2}\int \frac{f(\boldsymbol{k}) - f(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q})}{\varepsilon(\boldsymbol{k}) - \varepsilon(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q})}\, d\boldsymbol{k}. \quad (50,9)$$

Мы ограничимся при этом случаем длинных волн $q \ll k$. Тогда находим

$$\left.\begin{aligned} f(\boldsymbol{k}) - f(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}) &\simeq -\frac{\partial f}{\partial\varepsilon}\frac{\partial\varepsilon}{\partial\boldsymbol{k}}\boldsymbol{q}, \\ \varepsilon(\boldsymbol{k}) - \varepsilon(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}) &\simeq -\frac{\partial\varepsilon}{\partial\boldsymbol{k}}q. \end{aligned}\right\} \quad (50,10)$$

Поэтому

$$\varepsilon(\boldsymbol{q},\ 0) = 1 + \frac{4\pi e^2}{q^2}\int\left(\frac{\partial f}{\partial\varepsilon}\right)\rho(\varepsilon)\, d\varepsilon = 1 + \frac{4\pi e^2}{q^2}\rho(\varepsilon_F), \quad (50,11)$$

где $\rho(\varepsilon_F)$ — плотность уравнений на поверхности Ферми

$$\rho(\varepsilon_F) = \frac{3}{2}\frac{N}{\varepsilon_F}. \quad (50,12)$$

При этом мы использовали свойство распределения Ферми $f(\varepsilon)$, имеющего при низкой температуре вид ступенчатой функции (см. § 80 ч. III).

При не малых значениях $q$ вычислений $\varepsilon(q, \omega)$ является более сложным, но не вносит качественного изменения в характер этой величины[1]).

Посмотрим теперь, какой вид имеет поле точечного заряда в среде с диэлектрической проницаемостью (50,12). Если заряд покоится или медленно движется, то его потенциалу в пустоте $\frac{e^2}{r}$ отвечает компонента Фурье

$$\varphi_0(\boldsymbol{q}) = \frac{4\pi e^2}{q^2}. \qquad (50,13)$$

Потенциал заряда в среде может быть написан в виде

$$\varphi(\boldsymbol{r}, t) = \int d\boldsymbol{q}\, \frac{\varphi(\boldsymbol{q})}{\varepsilon(\boldsymbol{q}, 0)} = \frac{e e^{-r/l_{\mathrm{D}}}}{r}, \qquad (50,14)$$

где дебаевская длина $l_{\mathrm{D}}$ равна

$$l_{\mathrm{D}} = \left(\frac{1}{4\pi e^2 \rho(\varepsilon_F)}\right)^{1/2} = \left(\frac{\varepsilon_F}{6\pi e^2 N}\right)^{1/2}. \qquad (50,15)$$

Формула (50,14) показывает, что как и в классической плазме, поле заряда в квантовой плазме оказывается экранированным. Однако вместо дебаевского радиуса $1/\varkappa$ (§ 41 ч. IV) в вырожденной квантовой плазме длина экранирования дается формулой (50,15).

Оценка показывает, что $l_D$ составляет 1—2 Å. Таким образом, экранирующее влияние плазмы обеспечивает спадание сил взаимодействия на расстояниях порядка среднего расстояния между электронами в металле. Экранирование заряда электрона имеет наглядный смысл: вблизи каждого данного электрона концентрация остальных электронов оказывается пониженной. Это понижение концентрации обусловлено как чисто кулоновским взаимодействием, так и обменными силами. Последние неявно фигурировали в расчете диэлектрической проницаемости: использование распределения Ферми соответствовало учету принципа Паули и связанных с ним обменных взаимодействий.

Медленное движение электрона через плазму сопровождается «разбеганием» электронов с его пути. Таким образом, в действительности по плазме движется не электрон, а целая группа

[1]) См., например, Д. Пайнс, Элементарные возбуждения в твердых телах, «Мир», 1965. D. Pines, Elementary exitations in solids, W. Benjamin, NI — Amsterdam, 1963.

частиц, несущая суммарный заряд, равный заряду электрона. Это образование, состоящее из электрона и облака движущихся вместе с ним (или от него) электронов на фоне положительного фона, образованного ионами, может рассматриваться как некоторая квазичастица с зарядом $e$ и эффективной массой $m^*$. Как будет видно из дальнейшего, вклад в эффективную массу вносит не только взаимодействие с электронами, но с фононами решетки.

Существование экранирования имеет важное значение для понимания явлений, происходящих в металлах. Именно, благодаря экранированию силы взаимодействия между электронами, находящимися на сравнительно малых расстояниях, существенно уменьшаются.

К обсуждению этого вопроса мы вернемся несколько ниже, а пока рассмотрим, какой вид приобретает $\varepsilon(q, \omega)$ при высоких частотах.

Для этого преобразуем (50,8) несколько иначе, написав при $\omega \to \infty$:

$$\frac{1}{\varepsilon(\boldsymbol{k}) - \varepsilon(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}) + \hbar\omega} + \frac{1}{\varepsilon(\boldsymbol{k}) - \varepsilon(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{q}) - \hbar\omega} =$$

$$= \frac{2\varepsilon(\boldsymbol{k}) - \varepsilon(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}) - \varepsilon(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{q})}{[\varepsilon(\boldsymbol{k}) - \varepsilon(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}) + \hbar\omega]\,[\varepsilon(\boldsymbol{k}) - \varepsilon(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{q}) - \hbar\omega]} \simeq$$

$$\simeq -\frac{2\varepsilon(\boldsymbol{k}) - \varepsilon(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}) - \varepsilon(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{q})}{(\hbar\omega)^2}.$$

Поэтому для $\varepsilon(\boldsymbol{q}, \omega)$ получаем при $\omega \to \infty$:

$$\varepsilon(\boldsymbol{q}, \omega) \to 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2}, \qquad (50,16)$$

где через $\omega_p$ обозначена величина

$$\omega_p^2 = \frac{4\pi e^2}{\hbar^2 q^2} \int f(\boldsymbol{k})\,[2\varepsilon(\boldsymbol{k}) - \varepsilon(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}) - \varepsilon(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{q})]\,d\boldsymbol{k}. \qquad (50,17)$$

Можно написать, разлагая $\varepsilon(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q})$ в ряд,

$$2\varepsilon(\boldsymbol{k}) - \varepsilon(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}) - \varepsilon(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{q}) \simeq \frac{\partial^2\varepsilon}{\partial k^2} q^2 = \frac{\hbar^2}{m^*}.$$

Таким образом,

$$\omega_p^2 = \frac{4\pi N e^2}{m^*}.$$

Мы при этом воспользовались формулой (49,14) для определения эффективной массы. Сравнивая $\omega_p$ с частотой плазменных колебаний классической плазмы (46,16) ч. IV, мы убеждаемся в их тождественности. Дисперсионное уравнение, определяющее связь между частотой и волновым вектором, согласно (33,18)

ч. IV имеет вид

$$\varepsilon(\boldsymbol{q}, \omega) = 0.$$

При этом мы считаем плазменные волны продольными (ср. § 33 ч. IV).

Это дает

$$\omega = \omega_p.$$

Таким образом, в квантовой плазме, так же как в классической, могут существовать незатухающие (точнее, не затухающие в нашем приближении) плазменные колебания.

Смысл этого результата тот же, что и в классической теории плазмы: если сдвинуть достаточно большую группу отрицательно заряженных частиц с массой $m^*$ относительно неподвижного положительно заряженного фона, то сдвинутые частицы начнут совершать колебания около положения равновесия с плазменной частотой.

Если бы мы не ограничивались первым членом разложения в знаменателе (50,8), то вместо (50,16) для частоты $\omega(\boldsymbol{q})$ было бы получено более сложное дисперсионное уравнение, из которого следует, что возможны квантованные плазменные колебания с частотами, отличными от $\omega_p$. Кванты плазменных колебаний получили название плазмонов.

Посмотрим теперь, каковы энергетические условия возбуждения плазменных колебаний.

Для того чтобы электрон мог возбудить коллективные колебания в системе, т. е. излучить квант с частотой $\omega_p$ и волновым числом $\boldsymbol{q}$, необходимо, чтобы был выполнен закон сохранения энергии

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \frac{\hbar^2 (\boldsymbol{k} - \boldsymbol{q})^2}{2m} = \hbar\omega_p$$

или

$$\frac{\hbar^2}{2m}(2\boldsymbol{k}\boldsymbol{q} - \boldsymbol{q}^2) = \hbar\omega_p. \tag{50,18}$$

Поскольку для электронов волновой вектор $|\boldsymbol{k}|$ не превышает его значение на поверхности Ферми $k_F$, мы видим, что условие (50,18) не выполняется при малых значениях $\boldsymbol{q}$. Это означает, что возбуждение плазменных колебаний в системе свободных электронов возможно только при $q > \frac{\omega_p m}{\hbar k_p} = \frac{\omega_p}{v_F}$, где $v_F$ — скорость на поверхности Ферми. Энергия кванта плазменных колебаний $\hbar\omega_p \sim 20$ *эв*. Это означает, что отдельный электрон с термической энергией не может возбудить плазменные колебания в металле. Это и не удивительно — плазменные колебания отвечают коллективному движению больших групп частиц.

Если, однако, ввести в металл заряженную частицу, например, электрон, обладающую достаточно большой энергией, то такая частица может возбудить рассмотренные здесь плазменные колебания.

Это обстоятельство позволило успешно осуществить опыты с возбуждением колебаний в плазме твердых тел. Из сказанного не следует, однако, сделать вывод о том, что плазменные колебания вовсе отсутствуют в системе электронов в металле. В отличие от классической плазмы, в квантовой плазме могут существовать нулевые колебания, имеющие энергию $\frac{\hbar\omega_p}{2}$. Это — нулевые кванты или нулевые плазмоны.

В нулевых колебаниях участвуют коррелированным образом большие группы электронов.

Оценим размеры этой области по порядку величины. Длина волны, включающей группу частиц $\lambda_{\min} = \frac{2\pi}{q}$, должна быть больше среднего расстояния экранирования $l_D$. Пользуясь (50,18) и (50,15), получаем

$$\lambda_{\min} > \frac{v_F}{\omega_p}.$$

Более короткие плазменные волны не могут реализоваться.

Можно сказать, таким образом, что в плазменных волнах участвуют электроны, находящиеся на сравнительно больших расстояниях, больших чем $\lambda_{\min}$.

Мы располагаем теперь необходимыми сведениями о системе электронов в твердом теле и можем сделать более обоснованное суждение о роли взаимодействия между ними в общем поведении системы. Запишем часть гамильтониана, характеризующую взаимодействие между электронами в виде двух слагаемых:

$$H' = \sum_{i \neq j} \frac{e^2}{|r_i - r_j|} = \sum_{\substack{i \neq j \\ |r_i - r_j| > \lambda_{\min}}} \frac{e^2}{|r_i - r_j|} + \sum_{\substack{i \neq j \\ |r_i - r_j| < \lambda_{\min}}} \frac{e^2}{|r_i - r_j|}.$$

Первая сумма включает в себя только слагаемые, у которых расстояние между частицами больше $\lambda_{\min}$. Это взаимодействие при низких энергиях электронов $\varepsilon < \varepsilon_F$ приводит к возникновению нулевых плазменных колебаний. Эта сумма вносит некоторое постоянное слагаемое в полный гамильтониан. Вторая сумма распространяется на пары, находящиеся внутри сферы экранирования. Такие пары взаимодействуют между собой по закону (50,14). Поэтому соответствующее слагаемое дает лишь очень малый вклад в полный гамильтониан. Расчет показывает, например, что изменение теплоемкости электронного газа, обусловленное экранированным взаимодействием, составляет всего

несколько процентов. Таким образом, общий вывод, который можно сделать из приведенных выше рассмотрений, сводится к тому, что благодаря эффекту экранирования влияния взаимодействия между электронами на свойства твердого тела оказывается сравнительно не существенным. Это особенно относится к электронам с энергией, близкой к энергии Ферми. У этих электронов всегда имеется возможность оттолкнуть от себя облако электронов и двигаться вместе с этой «негативной» или «дырочной» шубой.

Расчет показывает, что такое образование обладает значительным временем жизни. Это обстоятельство позволяет считать образование (электрон + облако) стабильной квазичастицей. Большое время жизни связано с принципом Паули, который мешает электронам, входящим в облако «шубу», изменять свое состояние. Появление подвижных квазичастиц тесно связано с тепловым возбуждением системы, когда в ней происходят переходы электронов в незаполненные состояния. Поэтому систему электронов при $T \neq 0$ можно рассматривать как электронную жидкость, в которой движутся элементарные тепловые возбуждения. Эти возбуждения (или квазичастицы) движутся независимо друг от друга, обладают зарядом $(-e)$, массой $m^*$ и спином $1/2$ и подчиняются статистике Ферми. Для краткости мы будем называть эти квазичастицы электронами.

Подчеркнем, что неучтенные факторы, например, дискретное распределение положительного заряда, не изменяет полученного качественного вывода.

Взаимодействие электрона (квазичастицы) с фононами, как мы увидим ниже, приводит к образованию вокруг него облака, «шубы» фононов, которое движется вместе с ним, изменяя его массу, так что $m^* \to m^{**}$. Взаимодействие между электронами непосредственно проявляется в ряде эффектов, например, в изменении скорости звука в металле по сравнению с диэлектриком. И тем не менее, характер этого взаимодействия показывает, почему модель идеального газа свободных электронов правильно передает основные свойства системы электронов в металлах. Экранирование существенно уменьшает взаимодействие между электронами. Главный эффект взаимодействия сводится к изменению эффективной массы.

## § 51. Модель металла, полупроводника и диэлектрика

Мы можем перейти теперь к обсуждению свойств системы электронов в твердом теле.

На основании результатов предыдущего параграфа при качественном описании поведения системы электронов ее можно заменить системой квазичастиц — фермионов. В дальнейшем мы

будем именовать их электронами, что, однако, не должно привести к недоразумению. Прямые измерения (см. ниже) позволяют определить число нелокализованных электронов в 1 *см*³. У так называемых «хороших» металлов, таких как металлы щелочных и щелочноземельных элементов, серебра, меди, золота и ряда других, число нелокализованных электронов в 1 *см*³ примерно равно числу атомов, т. е. число таких электронов, приходящихся на один атом, равно единице.

У ряда металлов число «свободных» электронов, приходящихся на один атом, оказывается значительно меньшим единицы. Кроме того, проявляется существенная анизотропия, так что свойства системы электронов в разных кристаллографических направлениях оказываются различными. В виде примера можно привести висмут, обладающий резкой анизотропией в электрических и магнитных свойствах.

У неметаллов число «свободных» электронов на один атом оказывается столь малым, что система электрона образует невырожденный идеальный газ. Наконец, у ряда хороших диэлектриков, например, в NaCl или твердом кислороде, свободных электронов практически нет. Хотя плотность свободных электронов имеет решающее значение для поведения системы электронов в твердом теле, было бы неверным считать, что все различие между металлами, полупроводниками и изоляторами сводится к изменению этой характеристики и имеет количественный характер. В действительности оно имеет глубокий смысл. Это видно, например, из качественного различия в механизме электропроводности или в магнитных свойствах металлов, полупроводников и диэлектриков. Глубокое различие в их физических свойствах связано с разным характером энергетического спектра электронов.

Мы видели, что электронный спектр в кристалле имеет характер чередующихся зон дозволенных и недозволенных энергий. Напомним, что в каждой зоне дозволенных энергий имеется ограниченное число состояний. Именно, в ней имеется $2N$ состояний, где $N$ — число элементарных ячеек в единице объема и множитель 2 связан с двумя электронами, заполняющими каждое состояние. Если все состояния зоны дозволенных энергий попарно заполнены электронами, то они не могут изменять состояние и переходить из одного состояния в другое под действием приложенного внешнего поля. Такое тело ведет себя как изолятор. Если же в дозволенной зоне только часть состояний заполнена электронами, то переходы между состояниями возможны и тело ведет себя как металл.

Рассмотрим схематически образование металла из разделенных невзаимодействующих атомов. Пусть в последних имеется один валентный электрон на верхнем уровне энергии. Это

состояние будет двукратно вырожденным, поскольку энергия электрона не зависит от ориентации его спина. В системе, состоящей из $N$ независимых невзаимодействующих атомов, соответствующий уровень энергии будет $2N$-кратно вырожденным. При сближении атомов и установлении взаимодействия между ними уровень распадается на $2N$ смежных уровней, образующих сплошную полосу. Половина этих уровней энергии будет

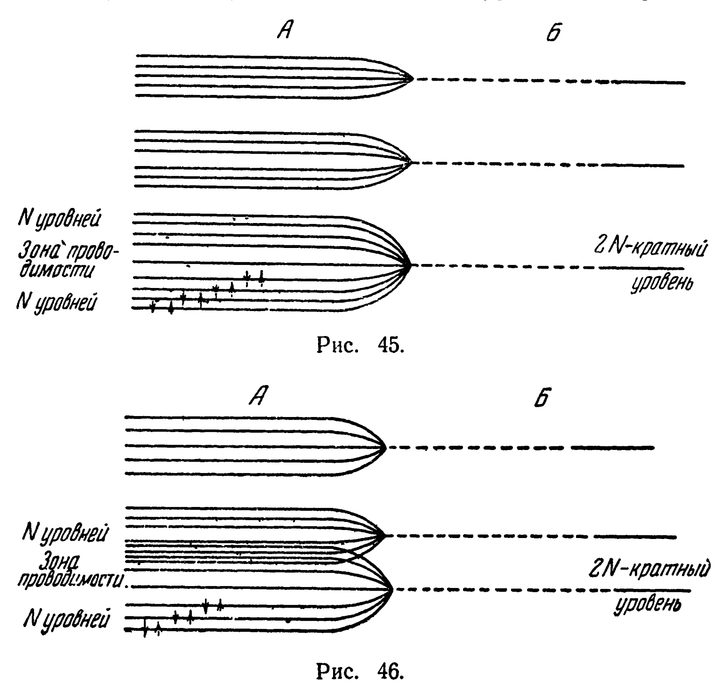



Рис. 45.



Рис. 46.

заполнена парами электронов, половина — свободна. Таким образом, нижняя полоса энергетических уровней, называемая зоной проводимости, возникает из нижних энергетических состояний валентного электрона. Возбужденные состояния валентного электрона, расщепляясь на большое число уровней, образуют другие зоны, не заполненные электронами (рис. 45). В некоторых случаях, изображенных на рис. 46, расширение полос так велико, что они перекрываются друг с другом. Между полосами дозволенных энергий лежат полосы недозволенных энергий. Образовавшийся кристалл будет обладать металлическими свойствами, поскольку незаполненные состояния непосредственно прилегают к заполненным состояниям. Такой случай имеет место у щелочных металлов, меди, серебра и некоторых других металлов.

Предположим теперь, что в атоме имеются два внешних электрона, находящихся в одном энергетическом состоянии с противоположно ориентированными спинами. Состояние электронов в атоме будет невырожденным. Соответствующее состояние системы из $N$ невзаимодействующих атомов будет $N$-кратно вырожденным. При образовании кристалла оно распадается на $N$ близких уровней, попарно заполненных электронами

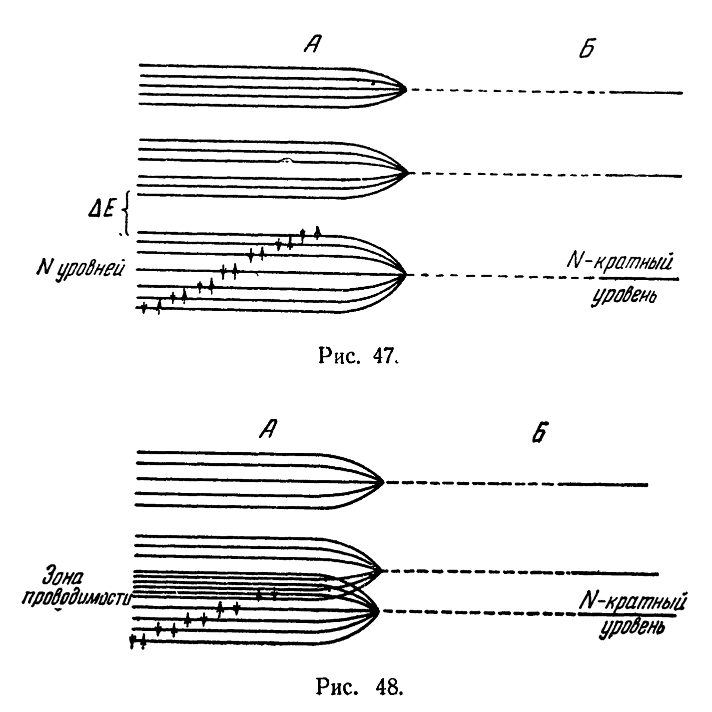



Рис. 47.



Рис. 48.

(рис. 47). Кристалл с таким расположением уровней является изолятором. В нем заполненные уровни энергии отделены от заполненных уровней областью недозволенных энергий с интервалом $\Delta\varepsilon$. Для того чтобы тепловое возбуждение могло перевести электрон из заполненного в незаполненное состояние, тепловая энергия должна быть порядка $\Delta E$. То же относится и к возбуждению электронов электрическим полем. Значения соответствующей температуры или напряженности поля оказываются очень большими. При обычных температурах и полях электроны остаются на заполненных уровнях и не могут переносить тока. Таким образом, диэлектрик отличается от металла не общим числом электронов, а характером расположения полос дозволенных энергий.

Однако из сказанного не следует делать вывод о том, что любые атомы с двумя внешними электронами образуют при своем объединении кристалл изолятора.

Помимо разобранного случая, возможно также расположение полос, изображенное на рис. 48. Благодаря перекрыванию полос, возникающих из нормального и возбужденного состояний атома, незаполненная полоса непосредственно прилегает к заполненной. Вещество такого типа — металл. Подобными металлами являются щелочноземельные металлы, свинец и ряд других. Современная теория не позволяет заранее сказать, какой из этих двух случаев реализуется при объединении атомов с данными свойствами. Само собой разумеется, что разделение кристаллов на металлы и диэлектрики охватывает лишь два предельных случая. Вся гамма промежуточных свойств между металлами и диэлектриками заполняется полупроводниками. У последних ширина запрещенной зоны сравнительно мала и становится сравнимой с энергией теплового возбуждения при сравнительно невысоких температурах.

## § 52. Магнитные свойства металлов. Парамагнетизм электронного газа

Оказалось, что целый ряд важных результатов может быть получен из простейшей модели металла, в которой металл рассматривается как некоторый потенциальный ящик с бесконечно высокими стенками, заполненный газом свободных электронов.

В частности, эта грубая схема оказывается достаточной для описания тепловых свойств металлов.

Оказалось, что магнитные свойства металлов определяются в первую очередь поведением нелокализованных электронов. При этом взаимодействие электронов с решеткой оказывает сравнительно незначительное влияние на магнитные свойства металлов.

Рассмотрим поведение вырожденного электронного газа, помещенного в магнитное поле. Оказывается, что в такой системе проявляются два основных эффекта. Один из них связан с наличием у электронов спина, а второй — с квантованием орбитального движения электрона в магнитном поле. Мы начнем с первого эффекта.

При наложении внешнего магнитного поля возникает преимущественная ориентация спиновых магнитных моментов в поле. В результате этого в системе возникает намагничивание.

Для вычисления магнитной восприимчивости напишем прежде всего выражение для свободной энергии свободных электронов в магнитном поле.

Имеем по формуле Гиббса — Гельмгольца (30,12) ч. III

$$F = -T\int_0^T \frac{E\,dT}{T^2}, \tag{52,1}$$

где

$$E = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\sum\int \frac{\varepsilon\,d\gamma}{e^{\frac{\varepsilon-\mu+\mu_0 H}{kT}}+1}. \tag{52,2}$$

Суммирование ведется по всем (т. е. по двум) возможным ориентациям спинового магнитного момента $\mu_0$ относительно поля $\boldsymbol{H}$. Напомним, что в отсутствие магнитного поля уровни энергии были вырождены и вместо суммирования в выражении для энергии (80,2) ч. III стоял множитель 2.

Таким образом,

$$E = \int \frac{\varepsilon}{e^{\frac{\varepsilon-\mu+\mu_0 H}{kT}}+1}\frac{d\gamma}{(2\pi\hbar)^3} + \int \frac{\varepsilon}{e^{\frac{\varepsilon-\mu-\mu_0 H}{kT}}+1}\frac{d\gamma}{(2\pi\hbar)^3}. \tag{52,3}$$

После подстановки (52,3) в (52,1) приходим к вычислению интегралов типа

$$\int \frac{\varepsilon\,d\gamma}{(2\pi\hbar)^3}\int_0^T \frac{dT}{T^2\left(e^{\frac{\varepsilon-\mu+\mu_0 H}{kT}}+1\right)} = \int \frac{d\gamma}{(2\pi\dot{\gamma})^3}\int_{\frac{1}{T}}^{\infty} \frac{\varepsilon\,du}{e^{(\varepsilon-\mu+\mu_0 H)\,u}+1} =$$

$$= \int \frac{d\gamma}{(2\pi\hbar)^3}\int_{\frac{1}{T}}^{\infty} \frac{(\varepsilon-\mu+\mu_0 H)\,du}{e^{(\varepsilon-\mu+\mu_0 H)\,u}+1} + \int \frac{d\gamma}{(2\pi\hbar)^3}\int_{\frac{1}{T}}^{\infty} \frac{(\mu-\mu_0 H)\,du}{e^{(\varepsilon-\mu+\mu_0 H)\,u}+1} =$$

$$= N(\mu-\mu_0 H) - \int \frac{d\gamma}{(2\pi\hbar)^3}\ln\left(1+e^{-\frac{\varepsilon-\mu+\mu_0 H}{kT}}\right),$$

где $N(\mu-\mu_0 H)$ — число частиц. Поэтому для свободной энергии можно написать

$$F = \mu N - kT\sum\int \frac{d\gamma}{(2\pi\hbar)^3}\ln\left(1+e^{-\frac{\varepsilon-\mu+\mu_0 H}{kT}}\right). \tag{52,4}$$

Рассмотрим случай слабого магнитного поля, для которого имеет место неравенство

$$\frac{\mu_0 H}{kT} \ll 1. \tag{52,5}$$

Разлагая (52,4) в ряд по степеням этой малой величины, получаем

$$F = N\mu - 2kT \int \frac{d\gamma}{(2\pi\hbar)^3} \ln\left(1 + e^{-\frac{\varepsilon-\mu}{kT}}\right) + \\ + \mu_0^2 H^2 kT \frac{\partial^2}{\partial\mu^2} \int \frac{d\gamma}{(2\pi\hbar)^3} \ln\left(1 + e^{-\frac{\varepsilon-\mu}{kT}}\right). \quad (52,6)$$

Вычислим интеграл

$$I = \int \frac{d\gamma}{(2\pi\hbar)^3} \ln\left(1 + e^{-\frac{\varepsilon-\mu}{kT}}\right) = 2\pi \frac{(2m)^{3/2} V}{(2\pi\hbar)^3} \int_0^\infty \sqrt{\varepsilon} \ln\left(1 + e^{-\frac{\varepsilon-\mu}{kT}}\right) d\varepsilon.$$

Интегрируя два раза по частям, имеем

$$\int_0^\infty \sqrt{\varepsilon} \ln\left(1 + e^{-\frac{\varepsilon-\mu}{kT}}\right) d\varepsilon = \sqrt{\varepsilon} \ln\left(1 + e^{-\frac{\varepsilon-\mu}{kT}}\right)\Bigg|_0^\infty - \int \frac{\sqrt{\varepsilon}\, d\varepsilon}{e^{\frac{\varepsilon-\mu}{kT}} + 1} = \\ = -\frac{2}{3kT} \int \varepsilon^{3/2} \frac{\partial f}{\partial \varepsilon} d\varepsilon = \frac{4}{15kT} \mu^{5/2}$$

в силу свойства распределения Ферми [см. (80,7) ч. III]. Поэтому

$$I = \frac{8\pi (2m)^{3/2} V \mu^{5/2}}{15 (2\pi\hbar)^3 kT}$$

и для свободной энергии получаем

$$F = N\mu + \frac{16\pi (2m)^{3/2} V \mu^{5/2}}{15 (2\pi\hbar)^3} - (\mu_0 H)^2 V \frac{8\pi (2m)^{3/2}}{15 (2\pi\hbar)^3} \frac{\partial^2 \mu^{5/2}}{\partial\mu^2}. \quad (52,7)$$

Магнитная восприимчивость, связанная с ориентацией спинов, согласно (18,3) ч. IV, равна

$$\chi_S = -\frac{1}{VH} \frac{\partial F}{\partial H} = \mu_0^2 \frac{4\pi (2m)^{3/2}}{(2\pi\hbar)^3} \sqrt{\mu}. \quad (52,8)$$

Формулу для восприимчивости можно записать в другом виде:

$$\chi_S = \frac{\mu_0^2 n_{эфф}}{kT}, \quad (52,9)$$

где для $n_{эфф}$ — эффективного числа непарных электронов, мы воспользовались формулой (80,17) ч. III.

Последнее выражение имеет наглядный смысл.

Именно, (52,9) совпадает с восприимчивостью газа, состоящего из $n_{эфф}$ частиц, свободно ориентирующихся в магнитном поле и имеющих собственный магнитный момент $\mu_0$.

Мы видим, что электронный газ обладает спиновым парамагнетизмом, не зависящим от температуры. Подчеркнем, что этот результат тесно связан с вырождением электронного газа.

## § 53. Диамагнетизм электронного газа

Оказывается, однако, что наряду со спиновым парамагнетизмом электронный газ обнаруживает орбитальный диамагнетизм.

Орбитальный диамагнетизм, открытый Ландау, не имеет столь наглядного характера, как спиновый парамагнетизм. Для вычисления магнитной восприимчивости, связанной с орбитальным движением, необходимо найти свободную энергию электронного газа в магнитном поле. Для этого в свою очередь следует найти энергию свободного электрона в однородном магнитном поле.

Рассмотрим решение уравнения Паули в простейшем случае движения свободного электрона в однородном магнитном поле. Выберем направление поля за ось $z$ и представим вектор-потенциал в виде[1])

$$A_x = -Hy; \qquad A_y = A_z = 0.$$

Уравнение Паули для стационарного движения можно написать в виде

$$\left\{\frac{1}{2m}\left(p_x + \frac{e}{c}Hy\right)^2 + \frac{p_y^2}{2m} + \frac{p_z^2}{2m} - \frac{e}{mc}s_z H\right\}\psi = E\psi. \qquad (53,1)$$

Из уравнения (53,1) следует прежде всего, что координатная и спиновая волновые функции являются независимыми.

Оператор вида $\mathrm{const}\, s_z$ не действует на переменные $(x, y, z)$, так что уравнению (53,1) удовлетворяет волновая функция вида

$$\psi = \varphi(s_z)\Phi(x, y, z). \qquad (53,2)$$

Поскольку координаты $x$ и $z$ в уравнение (53,1) явно не входят, можно попытаться искать решение его в виде

$$\Phi = e^{i/\hbar\,(p_x x + p_y z)}\,\zeta(y). \qquad (53,3)$$

Компоненты импульса $p_x$ и $p_z$ в направлении осей $x$ и $z$ сохраняются:

$$p_x H - H p_x = 0, \qquad p_z H - H p_z = 0$$

и могут пробегать непрерывный ряд значений.

Подставляя (53,3) в уравнение (53,1), получаем

$$\frac{\hbar^2}{2m}\zeta''(y) + \left(E_\perp - \frac{m\omega^2}{2}(y - y_0)^2\right)\zeta(y) = 0, \qquad (53,4)$$

---

[1]) Это представление вектора-потенциала для наших целей удобнее, чем (19,16) ч. I. Ясно, что оба выражения равноправны.

где обозначено

$$\left.\begin{aligned} E_\perp &= E - \frac{p_z^2}{2m} + \mu_0 s_z H, \\ \omega &= \frac{eH}{mc}, \\ y_0 &= -\frac{cp_x}{eH}. \end{aligned}\right\} \tag{53,5}$$

Уравнение (53,4) формально совпадает с уравнением движения линейного гармонического осциллятора с частотой $\omega$ (равной циклотронной частоте), колеблющегося около положения равновесия $y_0$. Поэтому, не повторяя выкладок § 10 ч. V, можно написать

$$E_\perp = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega \tag{53,6}$$

или

$$E = \frac{eH}{mc}\left(n + \frac{1}{2}\right) + \frac{p_z^2}{2m} - \mu_0 s_z H = 2\mu_0\left(n + \frac{1}{2}\right) + \frac{p_z^2}{2m} - \mu_0 s_z H \tag{53,7}$$

и

$$\zeta(y) = H_n[\omega(y - y_0)]\, e^{-\frac{|e|H}{2c\hbar}(y-y_0)^2}, \tag{53,8}$$

где $H_n$ — полиномы Эрмита.

Поскольку полиномы $H_n$ быстро уменьшаются с ростом $\omega(y - y_0)$ и становятся малыми при $(y - y_0) > \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$ [ср. (10,2) и (10,15) ч. V], в однородном магнитном поле частица свободно движется в направлении оси $z$ и совершает движение в ограниченной области

$$y_0 - \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \leqslant y \leqslant y_0 + \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}. \tag{53,9}$$

Движение в ограниченной области соответствует классическому движению заряда по окружности с циклотронной частотой.

Движению вдоль поля отвечает энергия $\frac{p_z^2}{2m}$, движению в плоскости $(x, y)$ — квантованная энергия $E_\perp$.

Энергия электрона не зависит от значений импульса $p_x$, так что состояния являются вырожденными.

Мы применим эти результаты к движению электрона в области пространства, ограниченной вдоль оси $y$. При этом компонента импульса $p_x$, в отличие от компоненты $p_z$, не может принимать произвольных значений. Действительно, положение точки «равновесия» $y_0$ не может выйти за пределы размеров области в направлении оси $y$. Поэтому из (53,5) следует, что

$$0 \leqslant p_x \leqslant \frac{eH}{c} L. \tag{53,10}$$

Зная энергию отдельного электрона, которая слагается из двух независимых частей — энергии орбитального движения и энергии, связанной с собственным магнитным моментом, мы можем написать свободную энергию электронного газа. Именно, мы можем положить:

$$F = F_0 + F_s + F_{\text{орб}}, \tag{53,11}$$

где $F_0$ — свободная энергия в отсутствие поля, $F_s$ — часть свободной энергии, обусловленная спиновым магнитным моментом и найденная выше, а $F_{\text{orb}}$ — вклад в свободную энергию орбитального движения

$$F_{\text{orb}} = -kT \int d\gamma' \sum_i \Omega_i \ln\left[1 + \exp\left\{\frac{\mu - 2\mu_0 H\left(n + \frac{1}{2}\right) - \frac{p_z^2}{2m}}{kT}\right\}\right]. \tag{53,12}$$

Своеобразие рассматриваемой системы заключается в том, что импульс $p_z$ в направлении поля изменяется непрерывно, тогда как движение в плоскости $(xy)$ квантовано. Поэтому по импульсу производится интегрирование, причем $d\gamma' = \frac{dz\,dp_z}{(2\pi\hbar)^3}$. При данной энергии $\varepsilon_n$ состояния орбитального движения в плоскости $(xy)$ вырождены. Кратность вырождения $\Omega(\varepsilon_n)$ равна

$$\Omega(\varepsilon_n) = 2 \cdot \frac{dx\,dy}{(2\pi\hbar)^2} 2\pi \int p_\perp\,dp_\perp = \frac{2\pi}{(2\pi\hbar)^2}\left(\int dx\,dy\right) p_\perp \Big|_{p_1}^{p_2},$$

где импульс $p_1$ отвечает движению в плоскости $xy$ при данной энергии $E_\perp$.

Иными словами, можно сказать, что кратность вырождения уровня энергии $E_\perp$ определяется большим, но дискретным (при конечном размере металлического образца в направлении $x$) числом возможных значений $p_x$.

Написав очевидное соотношение

$$2\mu_0 H n < \frac{p_\perp^2}{2m} < 2\mu_0 H\left(n + \frac{1}{2}\right)$$

мы видим, что $p_\perp$ может изменяться (при данном $E_\perp$) в интервале от

$$p_1 = \sqrt{4m\mu_0 H} \quad \text{до} \quad p_2 = \sqrt{4m\mu_0 H\left(n + \frac{1}{2}\right)}.$$

Отсюда находим

$$\Omega(\varepsilon_n) = \frac{4\pi m\mu_0 H}{(2\pi\hbar)^2} \int dx\,dy. \tag{53,13}$$

Тот же результат следует из (53,10)

Подставляя в (53,12) значения $d\gamma'$ и $\Omega(\varepsilon_n)$, находим

$$F_{\text{orb}} = -kT\,\frac{4\pi m\mu_0 HV}{(2\pi\hbar)^3}\int\limits_{-\infty}^{\infty} dp_z \sum_{n=0}^{\infty} \ln\left[1+\exp\frac{\mu-2\mu_0 H\left(n+\frac{1}{2}\right)-\frac{p_z^2}{2m}}{kT}\right]. \tag{53,14}$$

Рассмотрим случай слабых полей, когда выполнено неравенство (52,5). В этом случае логарифмическая функция аргумента $\frac{\mu_0 H}{kT}$ мало изменяется при изменении $n$ на $n+\frac{1}{2}$. Поэтому суммирование можно заменить интегрированием по формуле Эйлера

$$\sum_{n=0}^{\infty} f\left(n+\frac{1}{2}\right) \simeq \int\limits_0^{\infty} f(x)\,dx - \frac{1}{24} f'(x)\Big|_0^{\infty}.$$

С помощью формулы Эйлера находим

$$\sum_{n=0}^{\infty} \ln\left[1+\exp\left\{\frac{\mu-2\mu_0 H\left(n+\frac{1}{2}\right)-\frac{p_z^2}{2m}}{kT}\right\}\right] \simeq$$

$$\simeq \int\limits_0^{\infty} dx \ln\left[1+\exp\left\{\frac{\mu-2\mu_0 Hx-\frac{p_z^2}{2m}}{kT}\right\}\right] - \frac{1}{24}\,\frac{2\mu_0 H}{kT}\,\frac{1}{e^{\frac{p_z^2/2m-\mu}{kT}}-1},$$

откуда

$$F_{\text{orb}} = -kT\,\frac{4\pi m\mu_0 HV}{(2\pi\hbar)^3}\int\limits_{-\infty}^{\infty} dp_z \int\limits_0^{\infty} dx \ln\left[1+\exp\left\{\frac{\mu-2\mu_0 Hx-\frac{p_z^2}{2m}}{kT}\right\}\right] +$$

$$+\frac{\mu_0 H}{3}\,\frac{\pi m\mu_0 HV}{(2\pi\hbar)^3}\int\limits_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_z}{e^{\frac{p_z^2/2m-\mu}{kT}}+1}. \tag{53,15}$$

В первом интеграле введем новую переменную $u=2\mu_0 Hx$, а во втором положим $\varepsilon=\frac{p_z^2}{2m}$. Тогда без труда найдем

$$F_{\text{orb}} = -\frac{kT\,(2\pi)\,(2m)^{3/2}\,V}{(2\pi\hbar)^3}\int\limits_{-\infty}^{\infty} dp_z \int\limits_0^{\infty} du \ln\left[1+\exp\left\{\frac{\mu-u-p_z^2/2m}{kT}\right\}\right] +$$

$$+\frac{\pi}{6}\,\frac{(2m)^{3/2}(\mu_0 H)^2\,V}{(2\pi\hbar)^3}\int\limits_0^{\infty} \frac{d\varepsilon}{\sqrt{\varepsilon}}\,\frac{1}{e^{\frac{\varepsilon-\mu}{kT}}+1}. \tag{53,16}$$

Первое слагаемое в (53,16) не зависит от магнитного поля и не дает вклада в магнитную восприимчивость. Интеграл во втором слагаемом для сильно вырожденного электронного газа можно согласно (80,7) ч. III написать так:

$$\int \frac{(\varepsilon)^{-1/2}\,d\varepsilon}{e^{\frac{\varepsilon-\mu}{kT}}+1} \simeq 2\sqrt{\mu}.$$

Восприимчивость электронного газа, связанная с орбитальным движением, оказывается равной

$$\chi_{\text{orb}} = -\frac{1}{VH}\frac{\partial F_{\text{orb}}}{\partial H} = -\frac{4\pi(2m)^{3/2}\mu_0^2\sqrt{\mu}}{3(2\pi\hbar)^3}. \qquad (53{,}17)$$

Мы видим, что орбитальная магнитная восприимчивость отрицательна, т. е. отвечает диамагнетизму электронного газа.

Сравнивая (53,17) и (53,8), легко убедиться, что

$$|\chi_{\text{orb}}| = \frac{1}{3}\chi_s.$$

Поэтому полная восприимчивость электронного газа оказывается равной

$$\chi = \frac{2}{3}\chi_s = \frac{8\pi(2m)^{3/2}}{3(2\pi\hbar)^3}\mu_0^2\sqrt{\mu}. \qquad (53{,}18)$$

Оказывается, что это значение $\chi$ хорошо согласуется с опытными данными.

Более подробное рассмотрение, связанное с учетом влияния кристаллической решетки, не изменяет общего результата. Подчеркнем, что при вычислении диамагнитной восприимчивости мы считали магнитное поле слабым. В сильных магнитных полях, когда неравенство (52,5) не выполняется, магнитная восприимчивость оказывается функцией напряженности поля. Эта функция имеет осциллирующий характер (эффект де Гааза — Ван Альфена). Эти осцилляции связаны с изменением с полем энергии $E_\perp$ и соответствующим изменением заполнения уровня Ферми [1]).

## § 54. Ферромагнетизм

Ферромагнитные свойства, как было подчеркнуто в ч. IV, обнаруживаются только у сравнительно небольшого числа металлов в кристаллическом состоянии. Именно, ферромагнитными оказываются только металлы с незаполненными внутренними оболочками и некоторые сплавы.

---

[1]) См., например, Д. Займан, Принципы теории твердого тела, «Мир», 1966.

При макроскопическом описании свойств ферромагнитных тел подчеркивается в первую очередь существование очень большой и постоянной намагниченности.

При более детальном описании главной особенности ферромагнитных тел является корреляция в ориентациях магнитных моментов.

С этой точки зрения ферромагнитными свойствами обладают как собственные ферромагнетики, так и антиферромагнетики и ферримагнетики. Иными словами, в широком смысле, ферромагнетиками являются все сильно намагничивающиеся вещества. Измерение отношения магнитного момента к механическому показали, что у ферромагнитных веществ оно равно $\frac{e\hbar}{2mc}$, т. е. отвечает спиновой природе магнитного момента. Это показывает, что сильное намагничивание связано с взаимодействием спиновых моментов электронов.

Совокупность двух основных фактов — спиновой природы и намагничения и решающей роли незаполненных атомных оболочек, приводит к следующей схеме явления: энергетический спектр электронов в ферромагнитных металлах имеет две полосы. Одна из них, образованная сильно взаимодействующими валентными электронами, имеет большую ширину и является полосой проводимости. Другая возникает при взаимодействии электронов в незаполненных оболочках. Это взаимодействие является сравнительно слабым, поскольку перекрытие волновых функций внутренних электронов мало́. В соответствии с формулой (49,13) ширина этой полосы мала и она не может отвечать за проводимость.

Однако выше (§ 19 ч. IV) мы видели, что спин электронов незаполненных оболочек легко поворачивается. Поэтому сравнительно слабое взаимодействие между электронами может приводить к упорядоченному расположению их спинов.

Детальное рассмотрение этого взаимодействия — сложная задача. Мы ограничимся обсуждением следующей модели ферромагнетика: пусть имеется решетка правильно расположенных атомов, имеющих один электрон в $s$-состоянии, спин которого может иметь две ориентации. В отсутствии взаимодействия симметризованная волновая функция системы $N$ электронов имеет вид [ср. (65,6) ч. V)]

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum (-1)^n P_n \prod_j \psi_j(\boldsymbol{r}_j)\, \varphi_j(\uparrow), \qquad (54,1)$$

где векторный индекс $j$ означает номер атома, $\varphi(\uparrow)$ спиновую волновую функцию, отвечающую «правильному» положению спина.

Положим, что в основном состоянии системы все спины имеют одну и ту же ориентацию, например, $+1/2$. Такая

полностью упорядоченная ориентация спинов отвечает предельному намагничиванию системы. Ниже мы увидим, при каком условии такое состояние системы будет отвечать минимуму энергии системы.

Взаимодействие между электронами приводит к нарушению правильности ориентации их спинов. Часть спинов оказывается ориентированной неправильно. Малость возмущения означает, что число неправильно ориентированных спинов весьма мало́ по сравнению с полным числом спинов.

Рассмотрим возмущенное состояние, в котором неправильно ориентирован один электрон, например, у $m$-го атома.

Волновая функция такого состояния может быть написана в виде

$$\Psi_m = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum (-1)^n P_n \psi_m(r_m) \varphi_m(\downarrow) \prod_j{}' \psi_j(r_j) \varphi_j(\uparrow), \quad (54,2)$$

где штрих в знаке произведения означает отсутствие одного множителя. Поскольку система является вырожденной (т. е. неправильно ориентированный спин может принадлежать любому атому), по общим правилам теории возмущений для вырожденных систем, волновую функцию следует представить в виде

$$\Psi = \sum c_m \Psi_m. \quad (54,3)$$

Дальнейший расчет совпадает с приведенным в § 49. Все различие сводится к учету антисимметрии волновой функции (54,2). Поскольку перекрытие волновых функций мало́, мы ограничимся учетом взаимодействия электронов только атомов ближайших соседей [т. е. взаимодействием электрона $m$-го атома с электронами $(m-1)$ и $(m+1)$ атомов]. Тогда, аналогично (49,8), можем написать систему линейных уравнений

$$(E' - E_0 + \alpha) c_m + \sum_{m'} \beta(m') c_{m+m'} = 0, \quad (54,4)$$

где $E'$ — энергия возмущенного состояния, $E_0$ — энергия основного состояния, а $\alpha$ и $\beta$ — кулоновский и обменный интегралы,

$$\alpha = -\int \psi_m^* U' \psi_m \, dV,$$

$$\beta = \beta_{m,\,m+1} = \beta_{m,\,m-1} =$$

$$= -\int \psi_{m+1}^*(r_{m+1}) \psi_m^*(r_m) U' \psi_{m+1}(r_m) \psi_m(r_m) \, dV_m \, dV_{m+1}.$$

Здесь $U'$ — энергия взаимодействия между электроном и $m$-го атома и электронными атомным остатком $(m+1)$ или $(m-1)$-го атома.

Решение (54,4) гласит [ср. (49,9)]

$$c_m = e^{ikm}, \tag{54,5}$$

где вектор $\boldsymbol{k}$ определяется условиями периодичности. Поэтому волновая функция

$$\Psi = \sum e^{ikm}\Psi_m. \tag{54,6}$$

Для энергии возбужденного состояния в случае кубического кристалла получаем

$$E' = E_0 - \alpha - 2\beta(\cos k_x a + \cos k_y a + \cos k_z a). \tag{54,7}$$

Малым энергиям возбуждения отвечают малые значения вектора $\boldsymbol{k}$, так что

$$E' = E_0 - \alpha - \frac{\beta a^2 k^2}{2} = E_0 - \alpha - \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}; \quad m^* = \frac{\hbar}{\beta a^2}. \tag{54,8}$$

Волновая функция (54,6) и энергия (54,8) допускают наглядное истолкование.

Мы видим, что энергия возбуждения связана с обменным взаимодействием электронов. Для того чтобы энергия возбужденного состояния была выше энергии основного состояния, необходимо выполнение условия

$$\beta > 0,$$

т. е. обменный интеграл должен быть положительным. Возбужденному состоянию кристалла отвечает наличие неправильно ориентированного, перевернутого спина. Поскольку все атомы кристалла равноправны, перевернутый спин не закреплен за определенным атомом и может блуждать по всему кристаллу.

Перемещение по кристаллу от атома к атому «перевернутого» спина описывается волновой функцией (54,6); энергетический спектр кристалла дается формулой (54,7). Волновая функция (54,6) получила название спиновой волны. Формально перемещению «перевернутого» спина можно сопоставить движение некоторой квазичастицы, получившей название магнона. Действительно, формально спиновая волна описывает распространение по кристаллу некоторой квазичастицы с волновым вектором $\boldsymbol{k}$. Энергия этой квазичастицы дается формулой (54,8), где $m^*$ — ее эффективная масса. Магноны представляют элементарные возбуждения в системе ориентированных спинов. Энергию возбуждения всего кристалла можно рассматривать как сумму таких элементарных возбуждений или как энергию идеального газа магнонов, заполняющего весь объем кристалла.

Совершенно ясно, что такое описание возбужденного состояния является приближенным и разумно только при малых степенях возбуждения. Это означает, что число магнонов (число

спинов, возбужденных в «перевернутое» состояние) должно быть достаточно мало. Несколько ниже мы придадим этому утверждению количественный характер.

К магнонам относится все сказанное в § 47 по поводу описания возбужденного состояния системы частиц при помощи квазичастиц. Магноны могут взаимодействовать с другими квазичастицами например с фононами или с реальными частицами, обладающими магнитными моментами, например с нейтронами. Магноны следует считать подчиняющимися статистике Бозе — Эйнштейна. Действительно, в состоянии с данной ориентацией может находится любое число спинов электронов, принадлежащих различным атомам. Число магнонов, подобно числу фононов, не сохраняется. Возбуждению в «перевернутое» состояние спина того или иного электрона отвечает появление (или исчезновение) одного магнона.

Поэтому функция распределения для числа магнонов с данным волновым вектором представляет распределение Планка:

$$f(\boldsymbol{k})\,d\boldsymbol{k} = \frac{1}{(2\pi)^3}\,\frac{d\boldsymbol{k}}{e^{\hbar^2k^2/2m^*kT} - 1}. \qquad (54{,}9)$$

Зная характер возбуждений в кристалле, связанных с обменным взаимодействием электронов со свободным спином, мы можем вернуться к обсуждению магнитных свойств таких кристаллов.

Если обменный интеграл является положительным, то в основном состоянии все спины ориентированы в одну сторону. При этом кристалл обладает спонтанным магнитным моментом насыщения

$$M_0 = \mu_0 N,$$

где $N$ — число электронов в единице объема.

При $T \neq 0$ часть спинов будет перевернута. Число «перевернутых» спинов равно, очевидно, числу возбужденных магнонов. Последнее согласно (54,9) равно

$$N_{\text{магн}} = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\int \frac{d\boldsymbol{k}}{e^{\hbar^2k^2/2m^*(kT)} - 1}.$$

При низких температурах интеграл быстро сходится и можно заменить предел интегрирования на бесконечный. Это дает

$$N_{\text{магн}} = \frac{4\pi}{(2\pi)^3}\int\limits_0^\infty \frac{k^2\,dk}{e^{\hbar^2k^2/2m^*(kT)} - 1} =$$

$$= \frac{1}{2\pi^2}\left(\frac{2m^*kT}{\hbar^2}\right)^{3/2}\int\limits_0^\infty \frac{x^2\,dx}{e^{x^2} - 1} \simeq \frac{1{,}3}{\pi^2 a^3}\left(\frac{kT}{\beta}\right)^{3/2} \simeq \frac{1{,}3}{\pi^2}\,N\left(\frac{kT}{\beta}\right)^{3/2}. \qquad (54{,}10)$$

При этом мы воспользовались приближенным значением интеграла и заменили $\frac{1}{a^3}$ на число электронов в единице объема, а вместо $m^*$ подставили ее значение из (54,8). Возбуждение $N_{\text{магн}}$ магнонов уменьшает магнитный момент кристалла. Он оказывается равным

$$M = M_0\left[1 - \frac{1{,}3}{\pi^2}\left(\frac{kT}{\beta}\right)^{3/2}\right]. \qquad (54{,}11)$$

Формула (54,11) определяет спонтанный магнитный момент ферромагнетика в зависимости от температуры.

При некоторой температуре $T_C$, именуемой температурой Кюри, спонтанный магнитный момент должен обращаться в нуль.

Очевидно, что

$$T_C \approx \frac{\beta}{k}.$$

Если считать, что обменный интеграл $\beta$ — величина порядка $\frac{e^2}{a}$, где $a$ — постоянная решетки, то $T_C \sim 10^{3\circ}$ K, что согласуется с опытными данными. Температурная зависимость спонтанного магнитного момента, даваемая формулой (54,11), также хорошо согласуется с опытными данными при низких $(T \ll T_C)$ температурах.

При температурах $T \sim T_C$ изложенная теория теряет количественный смысл, поскольку число магнонов становится одного порядка с полным числом электронов.

Несмотря на свою предельную схематичность, изложенная теория ферромагнетизма не только объясняет сущность явления, но и позволяет получить некоторые количественные выводы.

Мы не учли анизотропию системы, связанную с анизотропией волновой функции электронов в незаполненной $\alpha$-оболочке. Не принято также во внимание спин-спиновые и спин-орбитальные взаимодействия, и взаимодействие с полем решетки, которые также создают анизотропию и приводят к появлению направлений легкого намагничивания. Частично эти эффекты достаточно хорошо изучены, частично же их теория, связанная с большими расчетными трудностями, до настоящего времени еще не разработана. Отсылая за деталями к специальной литературе[1]), остановимся лишь на одном вопросе — вопросе о знаке обменного интеграла.

---

[1]) С. В. Тябликов, Методы квантовой теории ферромагнетизма, «Наука», 1965; Д. Займан, цит. книга.

Как мы видели выше, условие $\beta > 0$ является решающим для существования ферромагнетизма. Обменный интеграл $\beta$ можно написать в виде

$$\beta = e^2 \int \psi^*_{n_1}(1)\, \psi^*_{a_2}(2) \left[\frac{1}{r_{12}} - \frac{1}{r_{1,\, n_1}} - \frac{1}{r_{2,\, n_2}}\right] \psi_{n_1}(2)\, \psi_{n_1}(1)\, dV_1\, dV_2.$$

Первое слагаемое в скобках дает кулоновское взаимодействие между электронами, два других — взаимодействие электронов с ядрами.

Для того чтобы интеграл был положительным, должна быть велика собственная обменная энергия. Это значит, что волновая функция должна быть велика вдали от ядер и мала у самых ядер. Этому условию удовлетворяют как раз электроны в $d$-состояниях, имеющие сравнительно большой момент.

Вместе с тем радиус орбит тех электронов, которые ответственны за взаимодействия, должен быть мал по сравнению с постоянной решетки.

В противном случае электроны будут близко подходить к «чужим» ядрам и отрицательные члены будут давать большой вклад в интеграл.

Совокупность этих условий имеется у атомов группы железа, которые являются наиболее яркими представителями ферромагнитных веществ. Чаще, однако, указанные довольно жесткие условия не выполняются и обменный интеграл оказывается отрицательным. В этом случае обменное взаимодействие электронов незаполненных оболочек приводит к другому основному состоянию. Именно, в основном состоянии соседние спины оказываются антипараллельными и спонтанное намагничение отсутствует.

Такие вещества получили название антиферромагнетиков. Антиферромагнетики, не обладая спонтанным намагничением, обнаруживают ряд характерных свойств.

Мы не можем, однако, остановиться на их рассмотрении и отсылаем читателя к специальной литературе[1]).

## § 55. Взаимодействие электронов с колебаниями решетки

Выше мы обсудили вопрос о взаимодействии электрона с кристаллом при правильном расположении ионов в узлах решетки. Движение по решетке электронов в сопровождении разбегающихся перед ним электронов квазичастицы не отличается от движения одиночного электрона. Квазичастица в решетке описывается такой же функцией Блоха.

---

[1]) См. Д. Займан, Принципы теории твердого тела, «Мир», 1966.

В дальнейшем мы обсудим вопрос о взаимодействии квазичастицы с колебаниями решетки. При этом, в соответствии со сказанным в конце § 51, мы без каких-либо оговорок будем именовать квазичастицу электроном.

Тепловые колебания решетки нарушают периодичность потенциала, действующего на электрон. При колебаниях решетки атомы испытывают смещения из положений равновесия, которые характеризуются вектором $\boldsymbol{\xi}_n$.

Нас интересует значение потенциальной энергии электрона $U$ в некоторой точке решетки $\boldsymbol{r}$. Ее можно найти для двух предельных случаев: в приближении деформируемых ионов и приближении твердых недеформируемых ионов. Обе модели приводят к весьма близким результатам. Мы будем пользоваться первой моделью, по-видимому, несколько более близкой к истинному положению вещей. В модели деформируемых ионов вся решетка заменяется колеблющимся континуумом. В некоторый момент времени потенциальная энергия электрона в точке $\boldsymbol{r}$ определяется мгновенной конфигурацией этого континуума. Смещениям континуума будут отвечать изменения потенциальной энергии электрона в точке $\boldsymbol{r}$. Та точка континуума, которая в положении равновесия имела координату $\boldsymbol{r}$, после смещения перейдет в точку $\boldsymbol{r}+\boldsymbol{\xi}(\boldsymbol{r})$. Значение потенциальной энергии электрона, которое в равновесии отвечало радиусу-вектору $\boldsymbol{r}+\boldsymbol{\xi}$, после смещения будет соответствовать радиусу-вектору $\boldsymbol{r}$. Иными словами, в точку $\boldsymbol{r}$ «придет» та потенциальная энергия, которая раньше «находилась» в точке $\boldsymbol{r}-\boldsymbol{\xi}(\boldsymbol{r})$. Изменение потенциальной энергии электрона в точке $r$ будет, очевидно,

$$U_{\text{реш}}=U(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{\xi})-U(\boldsymbol{r})=-\boldsymbol{\xi}(\boldsymbol{r})\nabla U, \tag{55,1}$$

если считать смещение достаточно малым. Естественно допустить, что для вектора $\boldsymbol{\xi}(\boldsymbol{r})$ можно написать выражение (47,14), в котором вектор $\boldsymbol{n}$ заменен на вектор $\boldsymbol{r}$.

Рассмотрим с помощью метода вторичного квантования систему электронов, на каждый из которых действует возмущение $U_{\text{реш}}$. Кулоновским взаимодействием электронов друг с другом мы будем пренебрегать. В соответствии с результатами, приведенными в § 47, мы можем написать гамильтониан системы электронов во внешнем поле решетки. Именно, будем характеризовать состояние системы электронов числами заполнения состояний с данным значением $\boldsymbol{k}$.

Пользуясь представлением вторичного квантования — формулой (99,23) ч. V, запишем энергию системы электронов в виде

$$\hat{H}=\sum_{\boldsymbol{k}} E_{\boldsymbol{k}}\hat{a}_{\boldsymbol{k}}^{+}\hat{a}_{\boldsymbol{k}}+\sum_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}'}\hat{a}_{\boldsymbol{k}'}^{+}\hat{a}_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{k}'\,|\,U\,|_{\text{реш}}\,|\,\boldsymbol{k})=\hat{H}_0+\hat{H}_{\text{вз}}.$$

Здесь $E_k$ представляет энергию электрона, движущегося в строго периодическом поле решетки. Операторы $\hat{a}_k^+$ и $\hat{a}_k$ удовлетворяют обычным соотношениям антикоммутации (99,9), ч. V.

Оператор взаимодействия определяется матричным элементом энергии взаимодействия электрона с внешним полем, в данном случае полем колеблющейся решетки. Согласно формуле (99,23)

$$(\boldsymbol{k}' \,|\, U_{\text{реш}} \,|\, \boldsymbol{k}) = \int \psi_{k'}^* U_{\text{реш}} \psi_k \, dV.$$

Поэтому оператор Гамильтона имеет вид

$$\hat{H} = \sum_k E_k \hat{a}_k^+ \hat{a}_k + \sum_{k'} \sum_k \hat{a}_{k'}^+ \hat{a}_k \int \psi_{k'}^* U_{\text{реш}} \psi_k \, dV. \qquad (55,2)$$

Подставляя в (55,2) волновые функции $\psi_k$, определенные формулой (48,11), и оператор $U_{\text{реш}}$ из (55,1), получаем для оператора взаимодействия

$$\hat{H}_{\text{вз}} = -\frac{1}{N} \sum_k \sum_{k'} \hat{a}_{k'}^+ \hat{a}_k \int u_{k'}^* e^{-ik'r} (\hat{\xi} \operatorname{grad} U) u_k e^{ikr} \, dV.$$

Используя явный вид оператора $\hat{\xi}_n$ (47,14), оператор взаимодействия запишем в виде

$$\hat{H}_{\text{вз}} = -\frac{1}{N^{\frac{3}{2}}} \sum_{k'} \sum_k \sum_{j=1}^{3} \hat{a}_{k'}^+ \hat{a}_k \int u_{k'}^* e^{-ik'r} \sum_{fj} \sqrt{\frac{\hbar}{2M\omega_f}}\, e_{fj} \times$$
$$\times \left(\hat{b}_{fj} e^{ifr} + \hat{b}_{fj}^+ e^{-ifr}\right) \operatorname{grad} U e^{ikr} u_k \, dV. \qquad (55,3)$$

Перейдем теперь от интегрирования по основной области к интегрированию по элементарной ячейке кристалла. С помощью соотношения (49,18) получаем для двух интегралов, входящих в (55,4)

$$\int\limits_G u_{k'}^* \operatorname{grad} U_k e^{i(k-k' \pm f)r} \, dV = \sum_n e^{i(k-k' \pm f)n} \int\limits_{\tau_0} u_{k'}^* \operatorname{grad} U u_k \, dV.$$
$$(55,4)$$

Используя формулу (49,19), мы видим, что интеграл (55,4) отличен от нуля только при выполнении равенства

$$\boldsymbol{k} - \boldsymbol{k}' \pm \boldsymbol{f} = 0 \qquad (55,5)$$

или, в более общем случае, равенства

$$\boldsymbol{k} - \boldsymbol{k}' \pm \boldsymbol{f} = \boldsymbol{K}. \qquad (55,6)$$

Мы ограничимся рассмотрением первого случая. Формула (55,5) показывает, что в процессе рассеяния электрона колеб-

лющейся решеткой имеет место закон сохранения, аналогичный закону сохранения импульса при столкновении свободных частиц. Поэтому процесс рассеяния формально можно рассматривать как процесс поглощения или излучения фонона электроном. До столкновения электрон обладал волновым числом $\boldsymbol{k}$, после столкновения он имеет волновое $\boldsymbol{k}'=\boldsymbol{k}\pm\boldsymbol{f}$, где $\boldsymbol{f}$ — волновой вектор фонона. Можно считать, что при переходе $\boldsymbol{k}\to\boldsymbol{k}'$ происходит поглощение (при $\boldsymbol{k}'=\boldsymbol{k}+\boldsymbol{f}$) или излучение (при $\boldsymbol{k}'=\boldsymbol{k}-\boldsymbol{f}$) фонона.

Ниже мы увидим, что при этом имеет место закон сохранения энергии, так что при рассеянии энергия электрона увеличивается на величину энергии фонона $\hbar\omega_f$

$$E_{\boldsymbol{k}'}=E_{\boldsymbol{k}}\pm\hbar\omega_f. \tag{55,7}$$

Эта наглядная трактовка процесса рассеяния электронов тепловыми колебаниями решетки оказалась весьма полезной[1]).

С помощью соотношения (49,19) для (55,5) получаем

$$\int\limits_G u^*_{\boldsymbol{k}'}e^{i(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k})\pm\boldsymbol{f})\boldsymbol{r}}(\operatorname{grad}U)\,u_{\boldsymbol{k}}\,dV=N\int\limits_{\tau_0}u^*_{\boldsymbol{k}\pm\boldsymbol{f}}(\operatorname{grad}U)\,u_{\boldsymbol{k}}\,dV.$$

Подставляя это значение в (55,3), находим:

$$\hat{H}_{\text{вз}}=-\sum_{\boldsymbol{k}fj}\sqrt{\frac{\hbar}{2MN\omega_f}}\,\boldsymbol{e}_{fj}\left\{\left[\int\limits_{\tau_0}u^*_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{f}}(\operatorname{grad}U)\,u_{\boldsymbol{k}}\,dV\right]\hat{a}^+_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{f}}\hat{a}_{\boldsymbol{k}}\hat{b}_{fj}+\right.$$
$$\left.+\left[\int\limits_{\tau_0}u^*_{\boldsymbol{k}-\boldsymbol{f}}(\operatorname{grad}U)\,u_{\boldsymbol{k}}\,dV\right]\hat{a}^+_{\boldsymbol{k}-\boldsymbol{f}}\hat{a}_{\boldsymbol{k}}\hat{b}^+_{fj}\right\}=$$
$$=-\sum_{\boldsymbol{k},f,j}\sqrt{\frac{\hbar}{2MN\omega_f}}\,\boldsymbol{e}_{fj}\left(\hat{a}^+_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{f}}\hat{a}_{\boldsymbol{k}}\hat{b}_{fj}S_++\hat{a}^+_{\boldsymbol{k}-\boldsymbol{f}}\hat{a}_{\boldsymbol{k}}\hat{b}^+_{fj}S_-\right), \tag{55,8′}$$

где через $S_\pm$ обозначены интегралы по элементарной ячейке

$$S_\pm=\boldsymbol{e}_{fj}\int\limits_{\tau_0}u^*_{\boldsymbol{k}\pm\boldsymbol{f}}\operatorname{grad}U u_{\boldsymbol{k}}\,dV. \tag{55,8″}$$

Формула (55,8) снова допускает наглядную трактовку рассеяния электрона как процесса, при котором происходит поглощение

---

[1]) Столкновения, при которых имеет место равенство (55,6), носят название процессов переброса Пайерлса. Нетрудно видеть, что при малых значениях $\boldsymbol{f}$ и значениях волнового вектора электрона $|\boldsymbol{k}|$, $|\boldsymbol{k}'|\leqslant\frac{\pi}{a}$ процесс переброса отвечает изменению направления волнового вектора электрона на обратное.

Процессы переброса не играют особой роли в рассматриваемых ниже явлениях электропроводности, но важны для установления теплового равновесия в металлах, особенно при низких температурах.

или испускание фонона. Действительно, по смыслу операторов $\hat{a}^+$, $\hat{a}$, $\hat{b}^+$ и $\hat{b}$ ясно, что матричный элемент оператора $\hat{a}^+_{k+f}\hat{a}_k\hat{b}_{fj}$ отвечает возникновению электрона с волновым числом $\boldsymbol{k}+\boldsymbol{f}$ и исчезновению электрона с волновым числом $\boldsymbol{k}$ и фонона с волновым числом $\boldsymbol{f}$. Аналогично, матричный элемент $\hat{a}^+_{k-f}\hat{a}_k\hat{b}^+_{fj}$ отвечает возникновению электрона с волновым числом $\boldsymbol{k}-\boldsymbol{f}$ и фонона с волновым числом $\boldsymbol{f}$ и исчезновению электрона с волновым числом $\boldsymbol{k}$. Воспользовавшись свойством периодичности потенциала $U$ и функций $u_k$, $u_{k+f}$, а также уравнением Шредингера для $u_k$, на основе некоторых упрощающих предположений можно исключить из $S_\pm$ неизвестную потенциальную энергию $U$. Вычисления, которые мы проведем ниже, дают для $S_\pm$

$$S_\pm = \pm \frac{i\hbar^2}{3m}(\boldsymbol{f}\boldsymbol{e}_{fj}) \int_{\tau_0} |\operatorname{grad} u_k|^2\, dV. \tag{55,9}$$

Из (55,9) следует, что величина $S_\pm$ отлична от нуля только для волн решетки с продольной поляризацией. Действительно,

$$\boldsymbol{e}_{f_1}\boldsymbol{f} = f, \qquad \boldsymbol{e}_{f_2}\boldsymbol{f} = \boldsymbol{e}_{f_3}\boldsymbol{f} = 0,$$

где индекс 1 относится к продольной поляризации, 2 и 3 — к поперечной. Таким образом, в рамках сделанных при вычислении $S$ допущений (см. ниже), рассеяние электрона происходит только на волнах решетки с продольной поляризацией.

Подставляя значение $S_\pm$ из (55,9) в оператор энергии взаимодействия (55,8), можно записать его в виде

$$\hat{H}_{\text{вз}} = -i\sum_{k,f} \frac{\hbar^2 f}{3m}\sqrt{\frac{\hbar}{2MN\omega_f}} \cdot \left(\int_{\tau_0} |\operatorname{grad} u_k|^2\, dV\right) \times \\ \times \left(\hat{a}^+_{k+f}\hat{a}_k\hat{b}_f - \hat{a}^+_{k-f}\hat{a}_k b^+_f\right). \tag{55,10}$$

Мы не пишем индекс $j = 1$ у операторов $\hat{b}$ для краткости. Дальнейшее упрощение получается, если связать $\omega_f$ и $f$ по формуле (47,16), справедливой при малых $f$, т. е. если пренебречь дисперсией частот. Тогда получаем для $\hat{H}_{\text{вз}}$

$$\hat{H}_{\text{вз}} = -i\sum_{k,f} D_\omega\left(\hat{a}^+_{k+f}\hat{a}_k\hat{b}_f - \hat{a}^+_{k-f}\hat{a}_k\hat{b}^+_f\right), \tag{55,11}$$

где

$$D_\omega = \sqrt{\frac{2g^2\hbar\omega_f}{9MNc^2}}; \quad g = \frac{\hbar^2}{2m}\int_{\tau_0} |\operatorname{grad} u_k|^2\, dV. \tag{55,12}$$

В следующем параграфе мы воспользуемся выражением (55,11) для вычисления вероятности перехода.

Заметим, что по порядку величины $g$ представляют среднюю кинетическую энергию электрона, движущегося в решетке.

В заключение нам следует доказать формулу (55,9). Для этой цели рассмотрим интеграл

$$\int_{\tau_0} \operatorname{div}\left(\boldsymbol{e}_{fj} u^*_{\boldsymbol{k}'} u_{\boldsymbol{k}} U\right) dV = \int_S \boldsymbol{e}_{fj} u^*_{\boldsymbol{k}'} u_{\boldsymbol{k}} U \, dS = 0,$$

который обращается в нуль в силу свойств периодичности функций $u_{\boldsymbol{k}}$ и потенциала $U$ на поверхности. С другой стороны, введенный интеграл равен

$$\int_{\tau_0} \operatorname{div}\left(\boldsymbol{e}_{fj} u^*_{\boldsymbol{k}'} u_{\boldsymbol{k}} U\right) dV = \boldsymbol{e}_{fj} \int U \operatorname{grad}\left(u^*_{\boldsymbol{k}'} u_{\boldsymbol{k}}\right) dV + \boldsymbol{e}_{fj} \int u^*_{\boldsymbol{k}'} u_{\boldsymbol{k}} \operatorname{grad} U \, dV = 0. \quad (55,13)$$

Таким образом, для величины $S$ получаем

$$S = \boldsymbol{e}_{fj} \int u^*_{\boldsymbol{k}'} u_{\boldsymbol{k}} \operatorname{grad} U \, dV = - \boldsymbol{e}_{fj} \int U \operatorname{grad}\left(u^*_{\boldsymbol{k}} u_{\boldsymbol{k}}\right) dV. \quad (55,14)$$

Потенциальную энергию $U$ можно исключить теперь с помощью уравнения Шредингера. Используя для функции $u_{\boldsymbol{k}}$ формулу (48,9), имеем

$$\frac{\hbar^2}{2m}\left[\Delta u_{\boldsymbol{k}} + 2i\boldsymbol{k} \operatorname{grad} u_{\boldsymbol{k}} - (k)^2 u_{\boldsymbol{k}}\right] + \left[E(\boldsymbol{k}) - U\right] u_{\boldsymbol{k}} = 0. \quad (55,15)$$

Для функции $u^*_{k'}$ запишем аналогичное уравнение

$$\frac{\hbar^2}{2m}\left[\Delta u^*_{\boldsymbol{k}'} + 2i\boldsymbol{k}' \operatorname{grad} u^*_{\boldsymbol{k}'} - (k')^2 u^*_{\boldsymbol{k}'}\right] + \left[E(\boldsymbol{k}') - U\right] u^*_{\boldsymbol{k}'} = 0. \quad (55,16)$$

Помножим уравнение (55,15) на величину $\boldsymbol{e}_{fj} \operatorname{grad} u^*_{\boldsymbol{k}'}$, а уравнение (55,16) на $e_{fj} \operatorname{grad} u_{\boldsymbol{k}}$ и полученные уравнения сложим. В результате легко найдем

$$S = -\int \boldsymbol{e}_{fj} U \operatorname{grad}\left(u^*_{\boldsymbol{k}'} u_{\boldsymbol{k}}\right) dV = -\frac{\hbar^2}{2m} \times$$
$$\times \int \boldsymbol{e}_{fj}\left[\nabla u^*_{\boldsymbol{k}'} \Delta u_{\boldsymbol{k}} + \nabla u_{\boldsymbol{k}} \Delta u^*_{\boldsymbol{k}'}\right] dV - \frac{i\hbar^2}{m} \boldsymbol{k} \int \nabla u_{k}\left(\boldsymbol{e}_{fj} \nabla u^*_{\boldsymbol{k}'}\right) dV + \frac{i\hbar^2}{m} \boldsymbol{k}' \times$$
$$\times \int \nabla u^*_{\boldsymbol{k}'}\left(\boldsymbol{e}_{fj} \nabla u_{\boldsymbol{k}}\right) dV - \boldsymbol{e}_{fj} \int \left[E(\boldsymbol{k}) u_{\boldsymbol{k}} \operatorname{grad} u^*_{k'} + E(\boldsymbol{k}') u^*_{\boldsymbol{k}'} \operatorname{grad} u_{k}\right] dV \times$$
$$+ \frac{\hbar^2}{2m} k^2 \int u_{\boldsymbol{k}} \boldsymbol{e}_{fj} \operatorname{grad} u^*_{\boldsymbol{k}'} \, dV + \frac{\hbar^2 k'^2}{2m} \int u^*_{\boldsymbol{k}'} \boldsymbol{e}_{fj} \operatorname{grad} u_{\boldsymbol{k}} \, dV. \quad (55,17)$$

Интегрирование ведется по ячейке кристалла, являющейся основной областью периодичности функций $u_{\boldsymbol{k}}$ и $u^*_{\boldsymbol{k}'}$. Поэтому

сумма первых двух интегралов после применения формулы Грина сводится к поверхностным интегралам и обращается в нуль.

Пятое и седьмое слагаемое можно проинтегрировать по частям, написав с учетом свойств периодичности

$$\int u^*_{k'} \operatorname{grad} u_k \, dV = -\int u_k \operatorname{grad} u^*_{k'} \, dV.$$

Тогда имеем окончательно

$$S = -\frac{i\hbar^2}{m} \boldsymbol{k} \int \nabla u_k \left(\boldsymbol{e}_{fj} \nabla u^*_{k'}\right) dV + \frac{i\hbar^2}{m} \boldsymbol{k}' \int \nabla u^*_{k'} \left(\boldsymbol{e}_{fj} \nabla u_k\right) dV -$$
$$- \boldsymbol{e}_{fj} \int \left[E(\boldsymbol{k}) - E(\boldsymbol{k}') + \frac{\hbar^2}{2m}\left(k^2 - k'^2\right)\right] u_k \operatorname{grad} u^*_{k'} \, dV. \quad (55,18)$$

В последнем интеграле содержатся величины $E(\boldsymbol{k}) - E(\boldsymbol{k}')$ и $\frac{\hbar^2}{2m}\left(k^2 - k'^2\right)$, которые по порядку величины равны разности энергий электрона до и после рассеяния, т. е. порядка энергии фонона $\hbar\omega_f$. Как мы увидим ниже, первый интеграл по порядку величины равен кинетической энергии электрона. Поэтому он существенно больше второго и последний может быть опущен.

Считая, в довольно грубом приближении, что функции $u_k \approx u^*_{k'}$, и обладают сферической симметрией, можем представить интеграл по элементарной ячейке в виде

$$\boldsymbol{A} = \int\limits_{\tau_0} \frac{\partial u_k}{\partial r} \frac{\boldsymbol{r}}{r} \left(\boldsymbol{e}_{fj} \frac{\partial u_k}{\partial r} \frac{\boldsymbol{r}}{r}\right) dV = \int\limits_{\tau_0} \left(\frac{\partial u_k}{\partial r}\right)^2 \frac{\boldsymbol{r}}{r^2} (\boldsymbol{e}_{fj}\boldsymbol{r}) \, dV. \quad (55,19)$$

При интегрировании вектор $\boldsymbol{r}$ пробегает все возможные значения, поэтому ясно, что вектор $\boldsymbol{A}$ может быть направлен только по единственному вектору $\boldsymbol{e}_{fj}$. Тогда имеем

$$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{e}_{fj} |\boldsymbol{A}|.$$

Модуль вектора $\boldsymbol{A}$ можно определить, умножив его на вектор $\boldsymbol{e}_{fj}$

$$|\boldsymbol{A}| = \int\limits_{\tau_0} \frac{1}{r^2} \left(\frac{\partial u_k}{\partial r}\right)^2 (\boldsymbol{e}_{fj}\boldsymbol{r})^2 \, dV = \frac{1}{3} \int\limits_{\tau_0} |\operatorname{grad} u_k|^2 \, dV. \quad (55,20)$$

После проведенных преобразований мы можем теперь выписать выражение для $S$; оно имеет вид

$$S = -\frac{i\hbar^2}{3m} (\boldsymbol{k} - \boldsymbol{k}') \boldsymbol{e}_{fj} \int\limits_{\tau_0} |\operatorname{grad} u_k|^2 \, dV. \quad (55,21)$$

Полагая $\boldsymbol{k}' = \boldsymbol{k} + \boldsymbol{f}$ и $\boldsymbol{k}' = \boldsymbol{k} - \boldsymbol{f}$, мы получаем выражения для $S_+$ и $S_-$, даваемые формулой (58,9).

## § 56. Полный гамильтониан твердого тела

Воспользовавшись полученными выше результатами, мы можем написать полный гамильтониан твердого тела в виде

$$\hat{H} = -\sum \frac{\hbar^2}{2M}\Delta_j - \frac{\hbar^2}{2m}\sum \Delta_i + \sum U(\boldsymbol{r}_i - \boldsymbol{R}_j) +$$
$$+\frac{1}{2}\sum_{i\neq j}\frac{e^2}{|\boldsymbol{r}_i - \boldsymbol{r}_j|} + \sum U(\boldsymbol{R}_i - \boldsymbol{R}_j) = \sum \hat{a}^+_{\boldsymbol{k},\sigma}\hat{a}_{\boldsymbol{k},\sigma}\varepsilon(\boldsymbol{k}) +$$
$$+\sum \varepsilon(f)\left(\hat{b}^+_f\hat{b}_f + \frac{1}{2}\right) + i\sum_{\boldsymbol{k},f} D_\omega\left(\hat{a}^+_{\boldsymbol{k}+f,\sigma}\hat{a}_{\boldsymbol{k},\sigma}\hat{b}_f - \hat{a}_{\boldsymbol{k}-f,\sigma}\hat{a}_{\boldsymbol{k},\sigma}\hat{b}^+_f\right) +$$
$$+\sum_{|\boldsymbol{r}_i - \boldsymbol{r}_j| > \lambda_{\min}}\frac{e^2}{|\boldsymbol{r}_i - \boldsymbol{r}_j|} + \sum_{|\boldsymbol{r}_i - \boldsymbol{r}_j| < \lambda_{\min}}\frac{e^2}{|\boldsymbol{r}_i - \boldsymbol{r}_j|}. \qquad (56,1)$$

Здесь $\varepsilon(\boldsymbol{k})$ — энергия электрона (квазичастицы) с волновым вектором $\boldsymbol{k}$. Операторы $\hat{a}^+_{\boldsymbol{k}}$ и $\hat{a}_{\boldsymbol{k}}$ представляют операторы уничтожения и рождения электрона (квазичастицы) с волновым вектором $\boldsymbol{k}$ и спиновым индексом $\sigma$. Энергия другой квазичастицы — фонона $\varepsilon(f) = \hbar\omega_f$.

Кулоновское взаимодействие между электронами на больших расстояниях сводится к нулевым плазменным колебаниям, на малых расстояниях — к экранированному взаимодействию и образованию квазичастиц. Что же касается взаимодействия между колеблющейся решеткой и электронами (квазичастицами), то оно формально описывается оператором столкновений двух независимых казичастиц одного фермиона и одного бозона. Это взаимодействие служит причиной переходов электрона из одних состояний в другие. Гамильтониан твердого тела в представлении вторичного квантования был впервые получен Фрелихом. Примером использования расчетной техники метода вторичного квантования послужит получение важной формулы для вероятности перехода электрона из состояния $\boldsymbol{k}$ в состояние $\boldsymbol{k}'$ с испусканием или поглощением одного фонона. В нашей задаче стационарные состояния невозмущенной системы представляют состояния с определенным числом фононов $n_f$ и определенным числом электронов $n_{\boldsymbol{k}\sigma}$. Последние в силу принципа запрета равны единице или нулю.

Если мы ограничимся первым приближением теории возмущений, то окажется, что возможны лишь переходы с поглощением или испусканием только одного фонона. Действительно, в оператор возмущения входят операторы $\hat{b}_f$ или $\hat{b}^+_f$, но не их произведения. Матричные же элементы от операторов $b_f$ и $b^+_f$ отличны от нуля только для переходов, при которых число фононов изменяется на единицу [см. § 99 ч. V].

Рассмотрим, для определенности, случай, когда электрон переходит из состояния с волновым числом $\boldsymbol{k}$ и энергией $E(\boldsymbol{k})$ в состояние $\boldsymbol{k}'$ с большей энергией. При этом происходит поглощение фонона с волновым числом $\boldsymbol{f}$, так что

$$\boldsymbol{k}' = \boldsymbol{k} + \boldsymbol{f}.$$

Поскольку полная энергия системы (электрон + фононы) должна оставаться постоянной, энергия электрона после столкновения

$$E(\boldsymbol{k}') = E(\boldsymbol{k}) + \hbar\omega_f.$$

В представлении вторичного квантования процессу перехода отвечает уменьшение на единицу числа электронов в состоянии $\boldsymbol{k}\sigma$ и фононов в состоянии $\boldsymbol{f}$ и увеличение на единицу числа электронов в состоянии $\boldsymbol{k}'\sigma$.

Для нахождения вероятности такого перехода следует вычислить матричный элемент

$$(H_{\text{вз}})_{\boldsymbol{k}'\boldsymbol{k}} = (n_{\boldsymbol{k}'\sigma} = 1,\ n_{\boldsymbol{k}\sigma} = 0,\ n_f - 1 \,|\, H_{\text{вз}} \,|\, n_{\boldsymbol{k}'\sigma} = 0,\ n_{\boldsymbol{k}\sigma} = 1,\ n_f). \quad (56,2)$$

Пользуясь правилом вычисления матричных элементов от произведения операторов и используя вид матричных элементов $\hat{a}_{\boldsymbol{k}}^{+}$ и $\hat{a}_{\boldsymbol{k}}$ и $\hat{b}_f^{+}$, $\hat{b}_f$, мы легко найдем, что из всей суммы (56,1) останется только один матричный элемент. Именно,

$$(H_{\text{вз}})_{\boldsymbol{k}'\boldsymbol{k}} = -iD_{\omega}(n_{\boldsymbol{k}'} = 1 \,|\, \hat{a}_{\boldsymbol{k}'}^{+} \,|\, n_{\boldsymbol{k}'} = 0)(n_{\boldsymbol{k}} = 0 \,|\, \hat{a}_{\boldsymbol{k}} \,|\, n_{\boldsymbol{k}} = 1)(n_f - 1 \,|\, \hat{b}_f \,|\, n_f). \quad (56,3)$$

Используя формулы (99,15) ч. V, мы видим, что произведение матричных элементов $\hat{a}^{+}$, $\hat{a}$ равно плюс или минус единице, в зависимости от чисел заполнения. Матричные элементы оператора $\hat{b}_f$ определяются формулами (47,16).

Вероятность перехода с поглощением фонона равна

$$dW_{-} = \frac{2\pi}{\hbar}\,|(H_{\text{вз}})_{\boldsymbol{k}'\boldsymbol{k}}|^2\,\delta[E(\boldsymbol{k}) - E(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{f}) + \hbar\omega_f]\,\frac{d\boldsymbol{f}\,dV}{(2\pi)^3} = \frac{2\pi}{\hbar} D_{\omega}^2 n_f \frac{d\boldsymbol{f}\,dV}{(2\pi)^3}\,\delta[E(\boldsymbol{k}) - E(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{f}) + \hbar\omega_f].$$

Если пренебрегать дисперсией и подставить значение $D_{\omega}^2$ из (55,12), мы легко находим, что

$$dW_{-} = \frac{4\pi g^2 n_f f}{9MNc}\cdot\delta\{E(\boldsymbol{k}) - E(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{f}) + \hbar cf\}\frac{d\boldsymbol{f}\,dV}{(2\pi)^3}.$$

Полная вероятность перехода электрона с поглощением фонона получается интегрированием по всем возможным значениям $\boldsymbol{f}$

и объему $V$:

$$W_- = 4\pi \frac{g^2}{9MNc} \int f n_f \delta \{E(\boldsymbol{k}) - E(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{f}) + \hbar c f\} \frac{d\boldsymbol{f}\, dV}{(2\pi)^3}. \quad (56,4)$$

Совершенно так же можно найти вероятность перехода с излучением одного фонона:

$$W_+ = 4\pi \frac{g^2}{9MNc} \int f (n_f + 1) \delta \{-E(\boldsymbol{k}) + E(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{f}) + \hbar c f\} \frac{d\boldsymbol{f}\, dV}{(2\pi)^3}. \quad (56,5)$$

Процессы с поглощением и испусканием одного фонона можно наглядно представить в виде диаграммы Фейнмана (рис. 49).

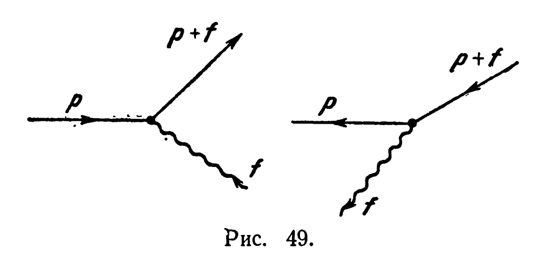



Рис. 49.

Здесь волнистой линией изображен фонон, сплошной — электрон. Если не ограничиваться переходами первого порядка, то возможны и другие процессы, изображенные на диаграммах Фейнмана (рис. 50 и 51).

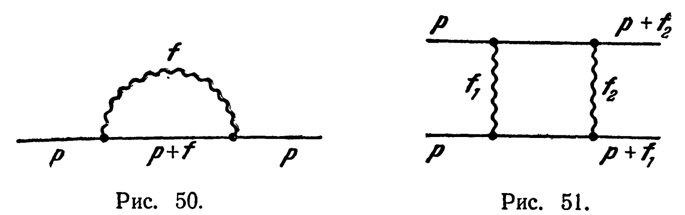



Рис. 50. Рис. 51.

Электрон может излучать виртуальный фонон и тут же его поглощать. Благодаря этому процессу электрон оказывается окруженным облаком или шубой виртуальных фононов с различными частотами. При движении электрона по решетке облако фононов следует за ним, изменяя его массу. Количественный расчет этого эффекта выходит за рамки этой книги.

Второй важный эффект второго порядка изображается диаграммой (рис. 51). Один из электронов испускает фонон $f_1$, а поглощает фонон $f_2$. Другой, наоборот, поглощает первый и испускает второй фонон.

Этот обмен фононами приводит в известных условиях к слабому притяжению между электронами. Несмотря на малость

эффекта, он играет важнейшую роль в явлениях, происходящих в металлах при низких температурах (см. § 64).

Следует заметить, что в приведенном выводе гамильтониана взаимодействия содержалось неявное допущение о том, что в результате взаимодействия с фононом электрон всегда может перейти в новое состояние. Это справедливо для электронов, находящихся в зоне размытости распределения Ферми.

При рассмотрении кинетических эффектов, например, электропроводности, нас будет интересовать взаимодействие именно с этими электронами. Однако при изучении некоторых других свойств металлов, таких, как влияние электронов на энергетический спектр системы фононов, оказывается существенным учет поведения всей системы электронов, в том числе электронов заполненной зоны. Эти электроны не могут совершать переходов между состояниями внутри зоны. Поэтому описание эффектов, включающих поведение всей системы электронов не может проводиться на основе гамильтониана (55,11).

ГЛАВА VI

# КИНЕТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ТВЕРДЫХ ТЕЛ

## § 57. Кинетическое уравнение для электронов в металлах

Вряд ли будет преувеличением утверждение, что в области теории твердого тела физическая кинетика добилась наибольших успехов и позволила качественно понять и количественно описать огромное число разнообразных и тонких эффектов. Мы в рамках этой книги можем изложить лишь основные результаты в этой быстро развивающейся области.

Рассмотрение кинетических явлений в твердых телах мы начнем с получения кинетического уравнения для носителей зарядов в металлах. Мы видели выше, что элементарные возбуждения в системе электронов в металлах можно уподобить газу свободных фермионов. Мы будем называть их электронами проводимости и описывать одночастичной функцией распределения $f(\mathbf{p}, \mathbf{r}, t)$. Для краткости квазиимпульс $\mathbf{p}$ мы будем называть импульсом. Эта терминология не может вызвать недоразумения.

При движении электронов проводимости они испытывают рассеяние на колеблющихся атомах решетки (столкновения с фононами) и на всякого рода неоднородностях решетки, которые именуются примесями. Достаточно хорошие результаты получаются, если считать это рассеяние упругим (см. § 58). На основании сказанного в § 50 столкновениями между электронами мы будем пренебрегать.

Если к металлу приложено внешнее электромагнитное поле, то функция распределения удовлетворяет кинетическому уравнению

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v}\frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} + \dot{\mathbf{p}}\frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}} = I. \qquad (57,1)$$

Групповая скорость $\mathbf{v}$ может быть написана в виде

$$\mathbf{v} = \frac{\partial \varepsilon(\mathbf{p})}{\partial \mathbf{p}}. \qquad (57,2)$$

В рамках статистического описания изменение квазиимпульса под действием внешней силы может учитываться в квазиклассическом приближении, т. е.

$$\dot{p} = e\left(\mathcal{E} + \frac{1}{c}[vH]\right). \tag{57,3}$$

Интеграл столкновений для частиц, подчиняющихся статистике Ферми, можно написать в приближении теории возмущений.

Вероятность перехода из состояния $p$ в состояние $p'$ может быть представлена в виде

$$w_{p\to p'} = (1 - f(p'))\,F(p,\ p',\ n_p), \tag{57,4}$$

где первый множитель дает вероятность того, что состояние не заполнено. Множитель $F(p, p', n_p)$ представляет вероятность перехода в вакантное состояние, вызванную всеми процессами упругого взаимодействия электронов с другими частицами — фононами решетки или примесями.

Вероятность обратного перехода в силу принципа микроскопической обратимости имеет вид

$$w_{p'\to p} = (1 - f(p))\,F(p',\ p,\ n_p). \tag{57,5}$$

Мы вернемся к формулировке кинетического уравнения в § 62, где будет уточнено выражение для вероятности перехода. Пока же мы не будем учитывать зависимость $F(p, p', n)$ от чисел заполнения $n_p$ и положим

$$F(p,\ p',\ n_p) = F(p,\ p').$$

С учетом (57,4) и (57,5) интеграл столкновений можно написать в виде

$$I = \int \{f(p')(1 - f(p)) - f(p)(1 - f(p'))\}\,\delta(\varepsilon - \varepsilon')\,F(p,\ p')\,dp', \tag{57,6}$$

как при столкновениях электронов с обычными атомами. Заметим, что это законно при $n_p \gg 1$.

Поскольку рассеяние считается упругим, можно написать

$$F(p,\ p')\,\delta(\varepsilon - \varepsilon')\,dp' = F(\alpha)\,d\Omega, \tag{57,7}$$

где

$$\alpha = (\widehat{p,\ p'}).$$

Таким образом, кинетическое уравнение приобретает вид

$$\frac{\partial f}{\partial t} + v\,\frac{\partial f}{\partial r} + e\left(\mathcal{E} + \frac{1}{c}[vH]\right)\frac{\partial f}{\partial v} = \int \{f(p')(1 - f(p)) - f(p)(1 - f(p'))\}\,F(\alpha)\,d\Omega. \tag{57,8}$$

Соотношение (57,8) представляет линеризованное уравнение Больцмана, весьма близкое по своей структуре к уравнению (27,3).

Заметим, что в стационарном состоянии при отсутствии внешних сил и в однородной системе уравнение (57,8) превращается в

$$f(\boldsymbol{p})(1-f(\boldsymbol{p}'))-f(\boldsymbol{p}')(1-f(\boldsymbol{p}))=0. \qquad (57,9)$$

С учетом изотропии, когда функция распределения зависит только от абсолютной величины импульса, что то же самое, от энергии решением этого функционального уравнения служит распределение Ферми:

$$f(\varepsilon)=\frac{1}{e^{\frac{\varepsilon-\mu}{kT}}+1}. \qquad (57,10)$$

Рассмотрение широкого класса кинетических явлений может быть проведено без конкретизации вида функции $F(\alpha)$. Поэтому мы в последующих параграфах будем считать $F(\alpha)$ некоторой заданной функцией. При этом мы получим решение кинетического уравнения теми же методами, что в классической кинетической теории газов. Затем, пользуясь выражениями для вероятностей перехода (56,9) и (56,10), мы найдем время релаксации или длину свободного пробега. Наконец, чтобы убедиться в точности этих приближений, мы проведем в § 62 последовательную запись и решение уравнения Больцмана в металле.

В случае слабых полей и малых отклонений от равновесного состояния, так же как в (24,3), будем пытаться искать решение (57,8) в виде

$$f=f_0(\varepsilon)+f_1(\boldsymbol{p},\ \Omega,\ t), \qquad (57,11)$$

где $f_0 \gg f_1$.

При этом для $f_1$ получаем уравнение, совпадающее с уравнением (27,10):

$$\frac{\partial f_1}{\partial t}+\boldsymbol{v}\left\{(\varepsilon-\mu)\nabla\left(\frac{1}{kT}\right)-\nabla\left(\frac{\mu}{kT}\right)+e\mathscr{E}\right\}\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon}+ \\ +\frac{e}{c}[\boldsymbol{vH}]\frac{\partial f_1}{\partial \boldsymbol{p}}+\boldsymbol{v}\frac{\partial f_1}{\partial \boldsymbol{r}}=\int(f_1'-f_1)F(\alpha)\,d\Omega'. \qquad (57,12)$$

## § 58. Электропроводность металлов

Если к металлу приложено постоянное электрическое поле $\mathscr{E}$, то в нем будет существовать стационарный ток. Необходимо ясно представить себе, почему движение электронов проводимости оказывается стационарным. Если бы интеграл столкновений в уравнении (57,8) можно было опустить, то оно

приобрело бы вид

$$\frac{\partial f}{\partial t} + e\mathscr{E}\frac{\partial f}{\partial p} = 0$$

и функция распределения зависела бы от времени. Фактически это означало бы, что электроны двигались ускоренно под действием силы $e\mathscr{E}$. Их скорость, а значит, и ток непрерывно нарастал во времени.

Источником потерь импульса, компенсирующим ускоряющее действие поля, служат столкновения электронов с фононами или примесями.

Только учитывая интеграл столкновений, можно написать уравнение Больцмана для функции распределения, не зависящей от времени.

Не повторяя выкладок § 27, можно написать для плотности тока выражение

$$\boldsymbol{j} = e\int \boldsymbol{v} f_1\, d\boldsymbol{p} = -\frac{e^2}{m}\int \lambda_{tr}\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon}\frac{\boldsymbol{p}}{v}(\boldsymbol{v}\mathscr{E})\, d\boldsymbol{p}. \tag{58,1}$$

Таким образом, электропроводность оказывается равной

$$\sigma_{ik} = -\frac{e^2}{m}\int \lambda_{tr}\frac{v_i}{v}p_k\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon}\, d\boldsymbol{p}. \tag{58,2}$$

В кристаллах с кубической симметрией поле $\mathscr{E}$ и ток $\boldsymbol{j}$ параллельны друг другу.

Выбирая направления вектора $\mathscr{E}$ на ось $x$, можно переписать (58,1) в виде

$$j = -e^2\mathscr{E}\int \lambda_{tr}\left(\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon}\right) v\cos^2\theta\, d\boldsymbol{p}, \tag{58,3}$$

где $\theta$ — угол между векторами $\boldsymbol{v}$ и $\mathscr{E}$.

В формуле (58,3) можно перейти к интегрированию по энергиям и по углам.

Это дает

$$\sigma = \frac{16\pi e^2 m}{3(2\pi\hbar)^3}\int_0^\infty \lambda_{tr}\varepsilon\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon}\, d\varepsilon. \tag{58,4}$$

Воспользуемся теперь свойством функции $\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon}$ для распределения Ферми в металле, рассмотренным в § 80 ч. III.

Имеем, аналогично (80,5) ч. III,

$$L_1 = \int \lambda_{tr}\varepsilon\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon}\, d\varepsilon \approx \int_{-\frac{\mu}{kT}}^{\infty} \lambda_{tr}(\mu + kTx)\frac{\partial f_0}{\partial x}\, dx \approx \int_{-\infty}^{\infty} \lambda_{tr}(\mu + kTx)\frac{\partial f_0}{\partial x}\, dx,$$

где $x = \frac{\varepsilon - \mu}{Tk}$.

Если длина свободного пробега $\lambda_{tr}$ зависит от энергии, то поскольку, согласно данным § 80 ч. III, производная $\frac{\partial f_0}{\partial x}$ ведет себя как $\delta$-функция, имеем

$$L_1 = \int_{-\infty}^{\infty} \lambda_{tr}(\varepsilon) \frac{\partial f_0}{\partial x} (\mu + kTx)\, dx \approx -\lambda_{tr}(\mu)\, \mu. \tag{58,5}$$

Отсюда для электропроводности получаем выражение

$$\sigma = \frac{j_z}{E} = \frac{16\pi e^2 m}{3(2\pi\hbar)^3} \lambda_{tr}(\mu)\, \mu, \tag{58,6}$$

или на основании (80,10) и (80,11) ч. III

$$\sigma = \frac{16\pi e^2 m \lambda_{tr}(\mu)\, \varepsilon_{\max}}{3(2\pi\hbar)^3} = \frac{16\pi e^2 m \lambda_{tr}(\mu)}{3(2\pi\hbar)^3} \frac{h^2}{2m} \left(\frac{3}{8\pi}\right)^{2/3} \left(\frac{N}{V}\right)^{2/3}. \tag{58,7}$$

Последнюю, окончательную формулу можно еще представить в другом виде, введя скорость электрона $v(\mu)$ с энергией, равной $\varepsilon = \mu$. С помощью (79,3) ч. III находим

$$\sigma = \frac{e^2 \lambda_{tr}(\mu)}{m\mu(\mu)} \frac{N}{V} = \frac{e^2 \lambda_{tr}(\mu)}{mv(\mu)} n. \tag{58,8}$$

Мы видим, что электропроводность зависит от числа электронов в единице объема $n$, а также от скорости электрона на поверхности Ферми $v(\mu)$ и длины свободного пробега электрона с энергией, лежащей на поверхности Ферми.

Важной особенностью полученного выражения для электропроводности металла является то, что она оказывается не пропорциональной числу электронов в единице объема так как в формуле (58,8) скорость $v(\mu)$ выражается через $n$. Причина этого совершенно ясна: в электропроводности принимают участие только электроны, состояния которых лежат в зоне размытости распределения Ферми. Только эти электроны являются электронами проводимости. Электроны, находящиеся в состояниях, лежащих в заполненной области, не могут совершать систематическое движение и переносить ток.

Формула (58,8) для электропроводности содержит две неизвестные величины — число электронов в единице объема $n$ и длину свободного пробега электронов с энергией, лежащей на поверхности Ферми, $\lambda(\mu)$. Скорость электронов $v(\mu)$, как мы уже сказали, выражается через $n$ по формулам § 79 ч. III.

В следующем параграфе будет показано, что величина $n$ может быть определена независимо от сопротивления. Тогда (58,8) позволяет выразить длину свободного пробега через электропроводность $\sigma$. Значение последней измеряется непо-

средственно. При этом оказывается, что значение $\lambda_{tr}$ существенно превышает межатомное расстояние (постоянную решетки). Кроме того, $\lambda_{tr}$ существенно зависит от температуры. Например, для меди, у которой можно принять, что на каждый атом решетки приходится один свободный электрон, $\lambda_{tr}$ изменяется от $7 \times 10^{-7}$ *см*, при $T \approx 1300°$ К до $4 \times 10^{-5}$ *см* при $T \approx 100°$ К, что в 300—2000 раз больше расстояния между атомами в решетке.

Расчет $\lambda_{tr}$, проведенный в § 61, показывает, что температурный ход $\lambda_{tr}$, а с ней и электропроводности $\sigma$, является различным в случае температур высоких и низких по сравнению с дебаевской температурой $\theta$.

При высоких температурах $T \gg \theta$, $\sigma \sim T$. При низких температурах $\sigma$ обнаруживает быстрое, пропорциональное $1/T^5$ возрастание с понижением температуры. При $T = 0$ в идеально чистом металле $\sigma \rightarrow \infty$, и омическое сопротивление стремится к нулю.

У загрязненных образцов, а также образцов с механическими дефектами — микротрещинами, остаточными механическими напряжениями и т. п., при весьма низких температурах (порядка нескольких абсолютных градусов) имеется так называемое остаточное сопротивление, не зависящее от температуры и пропорциональное концентрации примесей.

Таким образом, электропроводность металла при $T \neq 0$ имеет конечное значение, а сопротивление отлично от нуля. Лишь при $T = 0$, и притом в образце, не содержащем никаких примесей и дефектов, металлический проводник не оказывает никакого сопротивления прохождению тока. Такой проводник получил название идеального. Поскольку невозможно получить температуру, равную нулю, а также невозможно изготовить чистый образец, идеальный проводник представляет собой некоторый предел, к которому можно стремиться, понижая температуру и очищая металлы от примесей.

## § 59. Эффект Холла

Важные сведения о свойствах электронного газа можно получить, изучая поведение металлов, помещенных во внешнее магнитное поле.

Если металлический образец, по которому течет ток (направление тока примем за ось $x$), помещен в магнитное поле, направленное по оси $z$, в нем возникает электрическое поле $E_y$.

Происхождение этого эффекта, именуемого эффектом Холла, вполне очевидно.

Под действием силы Лоренца электроны, образующие ток и совершающие преимущественное движение, отклоняются в отри-

цательном направлении оси $y$. Они накапливаются на нижней грани металла до тех пор, пока создаваемое при этом электрическое поле не компенсирует действие отклоняющей силы. В дальнейшем электроны будут совершать стационарное движение.

Из сказанного ясно, что направление поля $E_y$ определяется знаком носителя заряда. Мы увидим также, что его величина непосредственно связана с числом носителей тока в единице объема. Оба указанных обстоятельства делают холл-эффект одним из важнейших методов изучения свойств металлов и, как это будет видно из дальнейшего, полупроводников. Перейдем к расчету поля $E_y$.

Напишем кинетическое уравнение Больцмана, учитывая, что в нашем случае сила $\boldsymbol{F}$ имеет компоненты:

$$F_x = eE_x + \frac{e}{c} H v_y,$$
$$F_y = eE_y - \frac{e}{c} H v_x,$$
$$F_z = 0.$$

Тогда кинетическое уравнение примет вид

$$e\left(E_x + \frac{v_y}{c} H\right)\frac{\partial f}{\partial p_x} + e\left(E_y - \frac{v_x}{c} H\right)\frac{\partial f}{\partial p_y} = I. \tag{59,1}$$

Как и в § 27, будем следовать методу Лоренца и искать решение уравнения Больцмана (59,1) в виде

$$f(\boldsymbol{p}) = f_0(p_0) + p_x f_1(p) + p_y f_2(p), \tag{59,2}$$

поскольку имеется электрическое поле в направлениях осей $x$ и $y$. Вычисление интеграла столкновений производится точно так же, как это было сделано в § 27. Тогда получается

$$I = -\frac{vp}{\lambda_{tr}}(f_1 \cos\theta + f_2 \sin\theta), \tag{59,3}$$

где $\theta$ — угол между направлением импульса и осью $x$.

Подставляя разложение (59,2) в (59,1), находим с точностью до величин второго порядка малости:

$$e\left(E_x + \frac{v_y H}{c}\right)\left(\frac{\partial f_0}{\partial p_x} + p_x\frac{\partial f_1}{\partial p_x} + f_1\right) =$$
$$= e\left(E_x + \frac{v_y H}{c}\right)\left(\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} v_x + f_1 + p_x\frac{\partial f_1}{\partial p_x}\right) \approx$$
$$\approx e\left(E_x v_x \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} + \frac{v_x v_y H}{c}\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} + F_x f_1 + E_x p_x \frac{\partial f_1}{\partial p_x} + \right.$$
$$\left. + v_y \frac{H}{c} f_1 + \frac{v_y p_x H}{c}\frac{\partial f_1}{\partial p_x}\right) \approx c\left(E_x v_x \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} + \frac{v_y H}{c} f_1\right).$$

Члены второго порядка малости $E_x p_x \frac{\partial f_1}{\partial p_x}$, $\frac{v_y p_x}{c} \frac{\partial f_1}{\partial p_x}$ и другие, опущены. Член $\frac{v_y H}{c} f_1$ нельзя опустить, как это будет видно из дальнейших вычислений. Аналогично находим:

$$e\left(E_y - \frac{v_x H}{c}\right)\left(\frac{\partial f_0}{\partial p_y} + f_2 + p_y \frac{\partial f_2}{\partial p_y}\right) \approx$$
$$\approx e\left(E_y v_y \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} - \frac{v_x v_y}{c} H \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} - \frac{v_x H}{c} f_2 + \ldots\right) \approx eE_y v_y \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} - \frac{ev_x H}{c} f_2.$$

Поэтому левая часть (59,1) приобретает вид

$$ve\left(E_x \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} - \frac{H}{c} f_2\right)\cos\theta + ve\left(E_y \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} + \frac{Hf_1}{c}\right)\sin\theta.$$

Приравнивая это выражение интегралу столкновений (59,3) и объединяя все члены, содержащие $\cos\theta$ и $\sin\theta$, находим

$$\left[ve\left(E_x \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} - \frac{1}{c} Hf_2\right) + \frac{vp}{\lambda_{tr}} f_1\right]\cos\theta +$$
$$+\left[ve\left(E_y \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} + \frac{H}{c} f_1\right) + \frac{vp}{\lambda_{tr}} f_2\right]\sin\theta = 0.$$

Ввиду произвольности угла $\theta$ получаем два уравнения для определения искомых функций $f_1$ и $f_2$:

$$\frac{e}{m} E_x \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} - \frac{eH}{mc} f_2 = -\frac{v}{\lambda_{tr}} f_1,$$
$$\frac{e}{m} E_y \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} + \frac{eH}{mc} f_1 = -\frac{v}{\lambda_{tr}} f_2.$$

Решение этой системы дает:

$$f_1 = -\frac{\lambda_{tr}}{v} \frac{e}{m} \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \frac{\left(E_x + \frac{\lambda_{tr}\omega_H}{v} E_y\right)}{1 + \left(\frac{\lambda_{tr}\omega_H}{v}\right)^2},$$

$$f_2 = -\frac{\lambda_{tr}}{v} \frac{e}{m} \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \frac{\left(E_y - \frac{\lambda_{tr}\omega_H}{v} E_x\right)}{1 + \left(\frac{\lambda_{tr}\omega_H}{v}\right)^2},$$

где

$$\omega_H = \frac{eH}{mc}.$$

Зная поправки к функции распределения, можно найти ток по направлению оси $x$ и поле $E_y$.

Так, имеем:

$$j_x = e \int v_x f \, d\mathbf{p} = C (E_x L_1 - E_y L_2), \tag{59,4}$$

$$j = 0 = e \int v_y f \, d\mathbf{p} = C (E_y L_1 + E_x L_2), \tag{59,5}$$

где обозначено:

$$L_1 = \int \frac{\lambda\varepsilon}{1 + \left(\frac{\lambda\omega_H}{v}\right)^2} \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \, d\varepsilon, \tag{59,6}$$

$$L_2 = \int \frac{\lambda\varepsilon \left(\frac{\lambda\omega_H}{v}\right)}{1 + \left(\frac{\lambda\omega_H}{v}\right)^2} \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \, d\varepsilon, \tag{59,7}$$

$$C = \frac{16\pi m e^2}{3 (2\pi\hbar)^3}. \tag{59,8}$$

Для краткости мы опускаем значок $tr$ при $\lambda$. Очевидно, что при $H \to 0$

$$L_1 \to \int \lambda\varepsilon \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \, d\varepsilon \quad \text{и} \quad L_2 \to 0.$$

При этом $j_x$ переходит в (58,3).

Для вычисления $L_1$ и $L_2$ можно воспользоваться свойствами функций $\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon}$.

В первом приближении

$$L_1 = -\frac{\lambda(\mu)\mu}{1 + \left(\frac{\mu(\mu)\omega_H}{v(\mu)}\right)^2}, \tag{59,9}$$

$$L_2 = -\frac{\lambda^2(\mu)\mu\omega_H}{v(\mu)} \frac{1}{1 + \left(\frac{\lambda(\mu)\omega_H}{v(\mu)}\right)^2} = -\frac{\lambda(\mu)\omega_H}{v(\mu)} L_1, \tag{59,10}$$

где $\lambda(\mu)$, $v(\mu)$ берутся на поверхности Ферми.

Из формул (59,4) и (59,5) можно найти проводимость металла, помещеннного в магнитное поле, $\sigma(H) = \frac{j_x}{E_x}$ и поперечное поле $E_y$.

Найдем прежде всего последнюю величину:

$$E_y = -\frac{L_2}{C\left(L_1^2+L_2^2\right)} j_x = -\frac{L_2}{L_1}\frac{j_x}{L_1 C}\frac{1}{1+\left(\frac{L_2}{L_1}\right)^2} =$$

$$= \frac{\lambda(\mu)\,\omega_H}{Cv(\mu)} \frac{\left[1+\left(\frac{\lambda(\mu)\,\omega_H}{v(\mu)}\right)^2\right]}{\lambda(\mu)\,\mu} \frac{j_x}{\left[1+\left(\frac{\lambda(\mu)\,\omega_H}{v(\mu)}\right)^2\right]} =$$

$$= \frac{\omega_H}{Cv(\mu)\,\mu} j_x = \frac{eHj_x}{mc\mu v(\mu)\,C}. \qquad (59,11)$$

Подставляя сюда значение $\mu \approx \varepsilon_{\text{макс}}$ и $v(\mu)$ из (80,11) и (79,3′) ч. III и $C$ из (59,8), после несложных преобразований получаем

$$E_y = RHj_x, \qquad (59,12)$$

где через $R$ обозначена величина

$$R = \frac{1}{enc}. \qquad (59,13)$$

Формула (59,12) показывает, что поперечное поле пропорционально текущему току $j_x$ и напряженности магнитного поля $H$.

Коэффициент пропорциональности $R$, именуемый постоянной Холла, зависит, как видно из его определения, только от двух величин — заряда носителя тока $e$ и числа частиц в единице объема. Существенно, что знак $R$, а следовательно, и направление поперечного поля $E_y$, совпадает со знаком носителя тока.

Проводимость в магнитном поле

$$\sigma(H) = C\frac{L_1^2+L_2^2}{L_1} = -\frac{L_2}{L_1}\frac{1}{RH} \approx \frac{\lambda(\mu)\,e}{mcv(\mu)}\frac{1}{R}. \qquad (59,14)$$

Поскольку $R$ не зависит от напряженности магнитного поля, в первом приближении (в отношении вычисления интегралов $L_1$ и $L_2$) правая часть не зависит от $H$. Это означает, что в этом приближении $\sigma(H) = \sigma$, т. е. изменения сопротивления в магнитном поле не происходит. В высших приближениях проводимость $\sigma(H)$ оказывается зависящей от напряженности поля.

Совокупность измерений проводимости $\sigma$ и постоянной Холла $R$ позволяет найти две неизвестные величины, $n$ и $\lambda$. Наоборот, задаваясь числом свободных электронов, приходящихся на атом, можно вычислить $R$.

Знак постоянной Холла отрицательный, когда перенос осуществляется электронами. Это имеет место у одновалентных металлов.

У двухвалентных металлов и металлов переходных групп, для которых имеет место перекрытие зон, в проводимости участвуют как электроны, так и дырки.

Поэтому знак часто оказывается положительным. Наблюдается также анизотропная постоянной Холла, особенно резко выраженная у таких металлов, как Bi.

В следующем приближении $\sigma(H)$ оказывается обратно пропорциональной квадрату напряженности магнитного поля. Однако в поведение $\sigma(H)$ в сильных полях, а также числовое значение этой функции в сильных полях плохо согласуется с опытными данными. Это связано с грубостью использованной выше модели. Учет эффектов анизотропии поверхности, всегда имеющей место в реальных кристаллах, позволяет существенно улучшить согласие теории с опытом.

## § 60. Оптические свойства системы электронов проводимости

В основу рассмотрения оптических свойств металла мы положим допущение, что взаимодействие электромагнитного поля световой волны с электронами проводимости и электронами атомных остатков происходит независимым образом. Взаимодействие атомов с электромагнитным полем обсуждалось в ч. V. Мы ограничимся поэтому обсуждением поведения системы электронов проводимости в поле световой волны. Заметим, что если частота поля $\omega$ не совпадает с одной из собственных атомных частот, основные оптические характеристики металлов определяются именно поведением электронов проводимости.

Для этого проще всего найти комплексную проводимость в зависимости от частоты поля, действующего на металл.

Как и при расчете статической проводимости, воспользуемся кинетическим уравнением Больцмана (57,12), которое в нашем случае приобретает вид

$$e\mathscr{E}\frac{\partial f_0}{\partial \boldsymbol{p}} + \boldsymbol{v}\frac{\partial f_1}{\partial \boldsymbol{r}} + \frac{\partial f_1}{\partial t} = \int (f_1' - f) F(\alpha)\, d\Omega' \simeq \frac{f_1' - f}{\tau}. \quad (60,1)$$

Мы удержали в нем член $\frac{\partial f_1}{\partial \boldsymbol{r}}$, но опустили член с магнитным полем $\left(\text{как малый в отношении } \frac{v}{c}\right)$.

Положим, что внешнее поле изменяется по закону

$$\mathscr{E} = \mathscr{E}_0 e^{i(\boldsymbol{\varkappa r} - \omega t)}.$$

Тогда решение уравнения (60,1) естественно пытаться искать в виде

$$f_1 = \alpha (\boldsymbol{v}\boldsymbol{E}_0)\, e^{i(\varkappa r - \omega t)}. \tag{60,2}$$

Подстановка в (60,1) дает

$$e\mathscr{E}_0 v \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} = \alpha v \mathscr{E}_0 \left[ i(\varkappa v) - i\omega + \frac{1}{\tau} \right],$$

откуда

$$f_1 = \frac{ev\mathscr{E}_0 \left( \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right) e^{i(\varkappa r - \omega t)}}{\left[ \frac{1}{\tau} - i\omega + i(\varkappa v) \right]}. \tag{60,3}$$

Поскольку $\varkappa \sim \frac{\omega}{c}$, а $v \ll c$, член, возникший от производной $\frac{\partial f_1}{\partial t}$, мал и можно записать

$$f_1 \simeq \frac{ev\mathscr{E}_0 \left( \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right) \frac{\lambda_{tr}}{v}\, e^{i(\varkappa r - \omega t)}}{[1 - i\omega\tau]} \tag{60,4}$$

Мы видим, что поправка к функции распределения оказывается комплексной. Из выражения для тока в случае кубического кристалла легко найти проводимость

$$\sigma(\omega) = \sigma(0) \frac{1 + i\omega\tau}{1 + \omega^2\tau^2}, \tag{60,5}$$

где $\sigma(0)$ — проводимость в постоянном поле. Поскольку $\tau$ может быть вычислена, формула (60,5) дает полное количественное описание оптических свойств системы электронов проводимости. Формула для проводимости в высокочастотном поле справедлива в области скин-слоя, толщина которого дается формулой (30,4) ч. IV. При этом необходимо, чтобы толщина скин-слоя $\delta$ была велика по сравнению с длиной свободного пробега $\lambda_{tr}$.

## § 61. Длина свободного пробега электрона в металлах

По определению, как и в § 27, в приближении (57,11) можно ввести понятие длины свободного пробега

$$\lambda_{tr} = \frac{1}{N\sigma_{tr}} = \frac{v_{эл}}{W},$$

где $v_{эл}$ — средняя скорость электрона и $W$ — вероятность его столкновения (в единицу времени) с рассеивателем.

Непосредственный смысл имеют величины $v_{эл}$ и $W$. Разумеется, длину свободного пробега нельзя понимать буквально как расстояние между последовательными соударениями. Мож-

но говорить о длине свободного пробега $\lambda$ лишь как о некоторой средней величине.

Как было уже сказано выше, в металле могут происходить столкновения электронов с фононами и с примесями в решетке. Соответствующие длины пробегов обозначим через $\lambda_ф$ и $\lambda_{пр}$. Очевидно, что электропроводность и другие кинетические величины определяются значением наименьшей из этих двух длин пробега (т. е. наиболее вероятными столкновениями). Как будет видно из дальнейших расчетов, такой длиной является обычно $\lambda_ф$. Поэтому наше рассмотрение начнется с вычисления $\lambda_ф$.

Полная вероятность того, что электрон испытает соударение с фононом, определяется суммой вероятностей $W = W_+ + W_-$, т. е. суммой вероятностей столкновения с излучением и поглощением фонона. Величины $W_+$ и $W_-$ даются формулами (56,4) и (56,5). Для конкретного расчета $W$ необходимо сделать следующие упрощающие допущения о величинах $\omega_f$ и $E(\boldsymbol{k})$, входящих в эти формулы:

1) будем считать, что для всех частот

$$\omega_f = cf, \tag{61,1}$$

где $c$ — скорость звука, не зависящая от $f$. Это предположение не всегда может считаться оправданным, особенно при высоких температурах. Однако оно не приводит к существенным погрешностям в конечном результате даже и в тех случаях, когда соотношение (61,1) выполняется не точно;

2) будем считать, что $E(|\boldsymbol{k}|)$ является квадратичной функцией $|\boldsymbol{k}|$

$$E(|\boldsymbol{k}|) = \alpha k^2, \tag{61,2}$$

где $\alpha = \frac{\hbar^2}{2m^*}$.

Это предположение справедливо для электронов, движущихся в почти заполненной или почти свободной зоне, т. е. для сильно связанных и квазисвободных электронов.

Рассмотрим прежде всего случай температур, высоких по сравнению с дебаевской $\Theta_c$. Тогда в формулах (56,4) и (56,5) можно положить

$$n_f \cong \frac{kT}{\hbar\omega_f} = \frac{kT}{\hbar cf} \gg 1. \tag{61,3}$$

Для вероятности $W$ теперь получаем:

$$W = \frac{2\pi}{\hbar}\frac{2g^2(kT)}{9NMc^2}\int [\delta(E_{\boldsymbol{k}-\boldsymbol{f}} - E_{\boldsymbol{k}} + \hbar cf) + \\ + \delta(E_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{f}} - E_{\boldsymbol{k}} - \hbar cf)]\frac{d\boldsymbol{f}\cdot V}{(2\pi)^3}. \tag{61,4}$$

Преобразования с дельта-функциями проделаем подробно.

Рассмотрим первый интеграл:

$$I_1 = \int \delta\left(E_{k-f} - E_k + \hbar cf\right) df. \qquad (61{,}5)$$

При высоких температурах в металле из-за вырождения состояний фактически подвижны только электроны, находящиеся в зоне размытости распределения Ферми. Энергия электронов $E_{эл} \sim E_{макс} \gg kT$, где $E_{макс}$ — уровень Ферми; волновые числа этих электронов $k \sim k_{макс} = \pi/a$.

В решетке возбуждены все фононы вплоть до фононов с волновым числом $f = f_{макс} = \pi/a$, причем последние представлены в наибольшем количестве. Энергии фононов $\hbar\omega_f \leqslant \hbar(\omega_f)_{макс} \sim \sim kT$. Таким образом, волновые векторы электронов и фононов — величины одного и того же порядка. Наоборот, энергии фононов много меньше энергий электронов. При столкновении электрона с фононами энергия электронов изменяется сравнительно мало, а его волновой вектор сильно. Это означает, что происходит значительное изменение направления движения электрона при каждом столкновении. Для всех фононов неравенство (61,3) выполнено автоматически; оно является более слабым, чем неравенство $f \leqslant f_{макс}$.

Переходя к вычислению $I_1$, напишем:

$$I_1 = \int \delta\{\alpha(\boldsymbol{k} - \boldsymbol{f})^2 - \alpha k^2 + \hbar cf\} f^2\, df \sin\theta\, d\theta\, d\varphi =$$

$$= 2\pi \int \delta(-2\alpha kf\cos\theta + \alpha f^2 + \hbar cf) f^2\, df \sin\theta\, d\theta. \qquad (61{,}5')$$

Интегрирование по углу $\theta$ проведем, вводя новую переменную: $u = -2\alpha kf\cos\theta + \alpha f^2 + \hbar cf$. При этом

$$I_1 = 2\pi \int f^2\, df \frac{1}{2\alpha kf} \int_{u_1}^{u_2} \delta(u)\, du,$$

где

$$u_1 = -2\alpha kf + \alpha f^2 + \hbar cf \quad (\text{что отвечает } \theta = 0),$$
$$u_2 = 2\alpha kf + \alpha f^2 + \hbar cf \quad (\text{что отвечает } \theta = \pi).$$

Очевидно, что

$$\int_{u_1}^{u_2} \delta(u)\, du = \begin{cases} 0, & \text{если } u_1 \text{ и } u_2 \text{ имеют одинаковый знак;} \\ 1, & \text{если } u_1 \text{ и } u_2 \text{ имеют разные знаки.} \end{cases}$$

Величина $u_2$ является существенно положительной. Поэтому величина интеграла $I_1 \neq 0$, если

$$u_1 = -2\alpha kf + \alpha f^2 + \hbar cf < 0$$

или

$$f < 2k - \frac{\hbar c}{\alpha}. \qquad (61,6)$$

Поскольку всегда $k \lesssim k_{\text{макс}} = \frac{\pi}{a}$, неравенство (61,6) не накладывает никаких ограничений на интегрирование по $f$. В силу этого получаем

$$I_1 = \frac{\pi}{2\alpha k} f^2_{\text{макс}} = \frac{\pi m^* f^2_{\text{макс}}}{\hbar^2 k}.$$

Совершенно такое же вычисление дает для интеграла

$$I_2 = \int \delta \left(E_{k+f} - E_k - \hbar c f\right) df = I_1.$$

Подставляя значение $I_1$ и $I_2$ в выражение для $W$, находим

$$W = \frac{8\pi^2 g^2 \cdot (kT)\, V m^* f^2_{\text{макс}}}{9MN\,(2\pi)^3 \hbar^3 k c^2}.$$

Введем $v_{\text{эл}} = \frac{\hbar k}{m^*}$ — скорость электрона, вместо $f_{\text{макс}}$ подставим $f_{\text{макс}} = \frac{\pi}{a}$, а объем кристалла положим равным $Na^3$. Для длины свободного пробега получается выражение

$$\lambda_{\text{ф}} = \frac{v_{\text{эл}}}{W} = \frac{9Mc^2 v^2_{\text{эл}} \hbar^2}{ng^2\,(kT)\,a}. \qquad (61,7)$$

Полезно произвести числовые оценки величин, входящих в $\lambda_{\text{ф}}$.

Скорость звука $c$ — обычно величина порядка $2 \times 10^5$ *см/сек.* Энергия электрона вблизи поверхности Ферми

$$E_{\text{макс}} \sim p_{\text{макс}} v_{\text{эл}} \sim \frac{\hbar}{a} v_{\text{эл}} \simeq 2 - 3 \text{ эв}.$$

Отсюда $v_{\text{эл}}$ порядка $10^8$ *см/сек.*

Величина $g$, определенная формулой (55,19), по порядку величины совпадает с кинетической энергией квазисвободного электрона. Но у квазисвободных электронов энергия близка к энергии Ферми (так как подвижные электроны находятся в зоне размытости распределения Ферми), таким образом,

$$g \sim 2 - 3 \text{ эв}.$$

Наконец, для металлов среднего атомного веса $Mc^2 \sim 1$ *эв.* Следовательно, по порядку величины

$$\lambda_{\text{ф}} \sim \frac{3Mc^2}{g} \left(\frac{\hbar v_{\text{эл}}}{a}\right) \frac{1}{g} \cdot \frac{\hbar v_{\text{эл}}}{kT} \sim \frac{3\hbar v_{\text{эл}}}{kT} \sim \frac{3E_{\text{макс}}}{kT} a. \qquad (61,8)$$

При энергии Ферми $E_{\text{макс}} \sim 2$ *эв* и комнатной температуре

$\left(kT \simeq \frac{1}{40}\ эв\right)$

$$\lambda_ф \simeq 200-250\ a.$$

Это значение $\lambda_ф$ хорошо согласуется с опытными данными.

Как видно из (61,7), $\lambda_ф \sim \frac{1}{T}$. Остальные величины, входящие в (61,8), для данного металла являются практически постоянными.

Рассмотрим теперь случай низких температур $kT < \Theta_c$. При этом энергия возбужденных фононов $\hbar\omega \sim kT$, их волновые числа

$$f \sim \frac{\hbar\omega}{c\hbar} \ll f_{макс} = \frac{\pi}{a}.$$

Энергия электронов лежит вблизи поверхности Ферми, т. е. попрежнему порядка $E \sim E_{макс}$; волновые числа электронов $k \sim k_{макс} \sim \frac{\pi}{a}$.

Поскольку $k \gg f$, закон сохранения энергии при столкновении электрона с фононом можно записать в виде

$$\frac{\hbar^2}{2m^*}(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{f})^2 - \frac{\hbar^2}{2m^*}k^2 - \hbar\omega_f \approx \frac{\hbar^2}{m^*}\boldsymbol{k}\boldsymbol{f} - h\omega_f = 0,$$

откуда следует, что

$$\cos\theta = \frac{c}{\left(\frac{\hbar k}{m^*}\right)} \sim \frac{c}{v_{эл}} \ll 1,$$

т. е. $\theta \approx \frac{\pi}{2}$. Это означает, что фонон излучается перпендикулярно к направлению движения электрона. Последний при этом отклоняется на малый угол $\vartheta$ — угол между вектором $\boldsymbol{k}$ и вектором $\boldsymbol{k}+\boldsymbol{f}$. По порядку величины угол $\vartheta$ равен

$$\vartheta \sim \frac{f}{k} \sim \frac{\hbar f}{\hbar k} \sim \frac{\hbar\omega}{\hbar c f_{макс}} \sim \frac{\hbar\omega}{\hbar\omega_{макс}} \sim \frac{T}{\Theta_c}.$$

Изменение волнового вектора электрона при каждом столкновении порядка

$$\Delta k \sim k\cos\vartheta - k \sim k\frac{\vartheta^2}{2} \sim k\left(\frac{T}{\Theta_c}\right)^2.$$

Поскольку каждое столкновение с фононом приводит лишь к малому изменению направления полета, для рассеяния на большой угол электрон должен испытать большое число столкновений $P$, которое определяется соотношением

$$P \cdot \Delta k \sim k$$

или

$$P \sim \left(\frac{\Theta_c}{T}\right)^2. \qquad (61,9)$$

Найдем теперь вероятность рассеяния с малым изменением энергии и импульса электрона при столкновении с одним фононом. Вероятность столкновения с поглощением фонона находится очень просто:

$$W_- = \frac{4\pi g^2 V}{9MN} \int \frac{n_f f^2}{\omega_f} \delta\left(E_k + \hbar\omega_f - E_{k+f}\right) \frac{f^2\, df \sin\theta\, d\theta\, d\varphi}{(2\pi)^3} =$$

$$= \frac{8\pi^2 g^2 V}{9MNc} \int \frac{n_f f^3 df}{(2\pi)^3} \delta\left(-\frac{\hbar^2}{m^*} kf\cos\theta + \hbar\omega_f\right) \sin\theta\, d\theta =$$

$$= \frac{1}{\pi} \frac{g^2 V m^*}{9MNc\hbar^2 k} \int\limits_0^{f_{\text{макс}}} \frac{f^2\, df}{e^{\frac{\hbar cf}{kT}} - 1} = \frac{1}{\pi(\hbar c)^3} \frac{g^2 V m^* (kT)^3}{9MNc\hbar^2 k} \int\limits_0^{\frac{\hbar c f_{\text{макс}}}{kT}} \frac{z^2\, dz}{e^z - 1}.$$

Поскольку

$$\frac{\hbar c f_{\text{макс}}}{kT} = \frac{\hbar\omega_{\text{макс}}}{kT} = \frac{\Theta_c}{T} \gg 1,$$

верхний предел в интеграле можно заменить на бесконечность. Тогда

$$W_- = \frac{1}{9\pi} \frac{g^2 a^3}{Mc} \cdot \frac{m^*}{\hbar^2 k} \left(\frac{kT}{\hbar c}\right)^3 \int\limits_0^\infty \frac{z^2\, dz}{e^z - 1}.$$

Последний интеграл вычислен в приложении IV т. I:

$$\int\limits_0^\infty \frac{z^2\, dz}{e^z - 1} = \frac{\pi^2}{3}.$$

Поэтому

$$W_- \approx \frac{g^2 a^3 (kT)^3}{9 v_{\text{эл}} M \hbar^4 c^4} \approx \frac{a^3}{9} \left(\frac{g}{Mc^2}\right) \frac{g}{\hbar v_{\text{эл}}} \cdot \left(\frac{kT}{\hbar c f_{\text{макс}}}\right)^3 f^3_{\text{макс}} \cdot c \approx$$

$$\approx \frac{a^3}{9} \left(\frac{g}{Mc^2}\right) \left(\frac{ga}{\hbar v_{\text{эл}}}\right) \left(\frac{kT}{\hbar c f_{\text{макс}}}\right) \frac{c}{a} \frac{\pi^3}{a^3} \approx 3\, \frac{c}{a} \left(\frac{T}{\Theta_c}\right)^3.$$

При вычислении вероятности перехода с излучением фонона нужно учитывать то обстоятельство, что для электрона переход в заполненное состояние запрещен. Это означает, что электрон не может излучать фононов с энергией, превышающей ширину зоны размытости распределения Ферми.

Если $\hbar\omega_f = \hbar cf > kT$, то, изучая соответствующий фонон, электрон должен был бы перейти в заполненное состояние.

Поэтому возможно излучение фононов с волновыми числами $f \leqslant \frac{kT}{\hbar c}$. С учетом этого обстоятельства имеем:

$$W_+ \approx \frac{4\pi g^2 V}{9MN(2\pi)^3 c} \int \frac{f^3 df \sin\theta\, d\theta\, d\varphi}{\left(e^{\frac{\hbar cf}{kT}} - 1\right)} \delta\left(\frac{\hbar^2 kf\cos\theta}{m^*} - \hbar cf\right) \approx W_-. \qquad (61,10)$$

Длина свободного пробега электрона до первого столкновения

$$\lambda_\text{ф}^1 = \frac{v_\text{эл}}{W} \sim a\left(\frac{v_\text{эл}}{c}\right)\left(\frac{\Theta_c}{T}\right)^3. \tag{61,11}$$

Наряду со средней длиной свободного пробега между двумя столкновениями можно ввести среднюю транспортную длину свободного пробега $\lambda_\text{tr}$, учитывающую эффективность соударений. Соответствующее сечение (ср. § 24) определено как

$$\sigma_\text{tr} = \int \sigma(1-\cos\theta)\,d\Omega \sim \int \sigma \frac{\overline{\theta^2}}{2}\,d\Omega.$$

Транспортная длина свободного пробега $\lambda_\text{tr}$, т. е. средний пробег до эффективного изменения импульса, в классической кинетике определяется как $\lambda_\text{tr} = \frac{1}{N\sigma_\text{tr}}$. В нашем приближении введем величину $\lambda_\text{tr}$, определив ее соотношением

$$\lambda_\text{tr} \approx \frac{v_\text{эл}}{W}\cdot P \approx \frac{av_\text{эл}}{c}\left(\frac{\Theta_c}{T}\right)^5. \tag{61,12}$$

Она очень быстро, как $\frac{1}{T^5}$, растет с понижением температуры. При очень низких температурах, порядка нескольких градусов, $\lambda_\text{tr}$ весьма велика по сравнению с $a$ и достигает макроскопических значений.

Зная длину свободного пробега, можно найти электропроводность по формуле (58,8).

Электропроводность металлов $\sigma$ выражается формулами

$$\sigma = \frac{e^2\lambda_\text{ф} n}{mv} = \frac{9ne^2Mc^2\hbar^2 v_\text{эл}}{\pi m g^2 (kT)\,a} \quad \text{при высоких температурах,} \tag{61,13}$$

$$\sigma = A\,\frac{ne^2}{m}\,\frac{\hbar Mc^2}{g^2}\,\frac{v_\text{эл}}{c}\left(\frac{\Theta_c}{T}\right)^5 \quad \text{при низких температурах,} \tag{61,14}$$

где $A$ — числовой коэффициент.

Все входящие в (61,13) и (61,14) величины известны или могут быть найдены из независимых измерений. Согласие между теорией и опытными значениями оказывается хорошим, что несколько неожиданно, учитывая обилие упрощений, сделанных в ходе расчетов, в частности использование модели квазисвязанных и квазисвободных электронов. Следует заметить, что при $T \to 0$ электропроводность нормальных (не сверхпроводящих) металлов не растет до бесконечно больших значений, но стремится к постоянному, не зависящему от температуры пределу. Это так называемое остаточное сопротивление, обусловленное рассеянием электронов примесями и неоднородностями. Его величина определяется концентрацией примесей.

Зная длину свободного пробега, можно найти электронную теплопроводность металла. При высоких температурах она

выражается формулой

$$\varkappa_{эл} \approx v_{эл} \lambda_{ф} C_V^{эл} \approx \lambda_{ф} \frac{kTv_{эл}}{E_{макс}} n \sim \text{const} \tag{61,15}$$

и не зависит от температуры.

Очевидно, что при $T \gg \Theta_c$ имеет место так называемый закон Видемана — Франца $\frac{T\sigma}{\varkappa} = \text{const}$. При низких температурах температуропроводность определяется длиной свободного пробега $\lambda_ф$. Действительно, при одиночном соударении с фононом энергия электрона изменяется на величину порядка энергии фонона, т. е. порядка $kT$. Это изменение энергии отвечает возможному переносу энергии электронами. Перенос больших энергий невозможен, поскольку электрон не может отдавать энергию, заметно превышающую $kT$. Поэтому механизм переноса энергии электронами сводится к передачам энергии порядка $I$ при каждом столкновении с фононом, которое отвечает отклонению электрона на малый угол.

Теплопроводность электронов при $kT \ll \Theta_c$ выражается формулой

$$\varkappa_{эл} \approx \lambda_ф^{(1)} C_V^{эл} v_{эл} \sim \lambda_ф^{(1)} \cdot \frac{kT}{E_{макс}} n v_{эл} \sim \frac{1}{T^2}, \tag{61,16}$$

где $\lambda_ф^{(1)}$ — длина свободного пробега до первого столкновения.

Совершенно очевидно, что при этом закон Видемана — Франца не имеет места. Отношение электропроводности к теплопроводности оказывается зависящим от температуры. Мы не можем в рамках этой книги останавливаться на других явлениях, связанных с электронным газом в металлах, и отсылаем читателя к специальной литературе[1]).

## § 62. Интеграл столкновений для электронов в металле

Перейдем теперь к последовательному рассмотрению кинетического уравнения и доказательству существования длины свободного пробега электронов в металле. Для этого следует прежде всего получить выражение для интеграла столкновений. Мы будем учитывать только соударение между электронами и фононами.

Рассмотрим некоторое состояние электрона $\boldsymbol{k}$. Электрон может покидать данное состояние $\boldsymbol{k}$ двояким путем: поглощая

[1]) См., например, Р. Пайерлс, Квантовая теория твердых тел, ИЛ, 1956; А. Вильсон, Квантовая теория металлов, Гостехиздат, 1941; Г. Бете и А. Зоммерфельд, Электронная теория металлов, Гостехиздат, 1938; Ч. Киттель, Квантовая теория твердых тел, «Наука», 1967; Дж. Займан, Принципы теории твердого тела, «Мир», 1966.

фонон $f$ или испуская фонон $f$, т. е.

$$k \begin{matrix} \nearrow k+f \\ \searrow k-f \end{matrix}.$$

Число электронов, уходящих в единицу времени из состояния $k$ путем излучения фонона, равно

$$\Phi(|k|)(1-\Phi(|k-f|))\,dW_+(k\to k-f),$$

где $dW_+(k\to k-f)$ дается формулой (56,5), а множитель $(1-\Phi(|k-f|))$ введен для учета принципа Паули. Благодаря этому множителю число электронов, переходящих в заполненное состояние, для которого $\Phi(k-f)=1$, равно нулю.

Число электронов, уходящих из состояния $k$ путем поглощения фонона, равно

$$\Phi(k)(1-\Phi(k+f))\,dW_-(k\to k+f),$$

где $dW_-(k\to k+f)$ определено в (56,4). Полное число электронов, покидающих состояние $k$ за 1 *сек*, получается интегрированием суммы приведенных выражений по всем возможным значениям $f$, т. е.

$$I_- = \int \{\Phi(k)(1-\Phi(k-f))\,dW_+(k\to k-f) + \\ + \Phi(k)(1-\Phi(k+f))\,dW_-(k\to k+f)\}.$$

Интегрирование ведется по всем значениям $|f|$ и всем ориентациям вектора $f$. Напишем, далее, число электронов, попадающих в единицу времени в состояние $k$ в результате испускания и поглощения фононов электронами, находящимися в других состояниях. Рассуждения, аналогичные приведенным, дают:

$$I_+ = \int \{\Phi(k+f)(1-\Phi(k))\,dW_+(k+f\to k) + \\ + \Phi(k-f)(1-\Phi(k))\,dW_-(k-f\to k)\}.$$

Составляя баланс электронов, можем написать:

$$I_{\text{столкн}} = I_+ - I_-.$$

Подставляя значения $I_+$ и $I_-$ и входящих в них вероятностей переходов $dW_+$ и $dW_-$, согласно формулам § 56 можем написать интеграл $I_{\text{столкн}}$ в виде

$$I_{\text{столкн}} = \frac{4\pi}{9\hbar}\left(\frac{\hbar}{MN}\right) g^2 V \int \frac{f^2}{\omega_f} \{\{(n_f+1)\Phi(k+f)(1-\Phi(k))\delta(E_{k+f} - \\ - E_k - \hbar\omega_f) + n_f(1-\Phi(k))\Phi(k-f)\delta(E_{k-f}-E_k+\hbar\omega_f)\} - \\ - \{(n_f+1)\Phi(k)(1-\Phi(k-f))\delta(E_k-E_{k-f}-\hbar\omega_f) + \\ + n_f\Phi(k)(1-\Phi(k+f))\delta(E_k-E_{k+f}+\hbar\omega_f)\}\}\frac{df}{(2\pi)^3}.$$

Объединяя процессы с одинаковыми дельта-функциями и подставляя $I_{\text{столкн}}$ в кинетическое уравнение, получаем:

$$\frac{\partial \Phi}{\partial t}+\boldsymbol{v}\frac{\partial \Phi}{\partial \boldsymbol{r}}+\frac{\boldsymbol{F}}{\hbar}\frac{\partial \Phi}{\partial \boldsymbol{k}}=\frac{4\pi V}{9\hbar}\left(\frac{\hbar}{MN}\right)g^2\int\frac{f^2}{\omega_f}\times$$
$$\times\{[\Phi(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{f})(1-\Phi(\boldsymbol{k}))(n_f+1)-\Phi(\boldsymbol{k})(1-\Phi(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{f}))n_f]\times$$
$$\times\delta(E_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{f}}-E_{\boldsymbol{k}}-\hbar\omega_f)+[n_f(1-\Phi(\boldsymbol{k}))\Phi(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{f})-$$
$$-(n_f+1)\Phi(\boldsymbol{k})(1-\Phi(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{f}))]\delta(E_{\boldsymbol{k}-\boldsymbol{f}}-E_{\boldsymbol{k}}+\hbar\omega_f)\}\frac{d\boldsymbol{f}}{(2\pi)^3}. \quad (62,1)$$

При этом, объединяя члены, мы воспользовались четностью дельта-функции

$$\delta(E_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{f}}-E_{\boldsymbol{k}}-\hbar\omega_f)\equiv\delta(E_{\boldsymbol{k}}-E_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{f}}+\hbar\omega_f).$$

Убедимся прежде всего, что в состоянии равновесия функция распределения электронов $\Phi(\boldsymbol{k})\equiv\Phi_0$ представляет распределение Ферми — Дирака, а функция распределения фононов $n_f\equiv n_0$ — распределение Бозе — Эйнштейна. В состоянии равновесия $\frac{\partial \Phi}{\partial t}=0$, $\boldsymbol{v}=0$, $\boldsymbol{F}=0$, таким образом,

$$I_{\text{столкн}}=0. \quad (62,2)$$

Нетрудно видеть, что условие (62,2) выполняется, если каждая из квадратных скобок в подынтегральном выражении (62,1) обращается в нуль, т. е.

$$\Phi_0(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{f})(1-\Phi_0(\boldsymbol{k}))(n_f+1)-\Phi_0(\boldsymbol{k})(1-\Phi_0(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{f}))n_f=0, \quad (62,3)$$
$$E(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{f})=E(\boldsymbol{k})+\hbar\omega_f,$$
$$\Phi_0(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{f})(1-\Phi_0(\boldsymbol{k}))n_f-\Phi_0(\boldsymbol{k})(1-\Phi_0(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{f}))(n_f+1)=0,$$
$$E(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{f})=E(\boldsymbol{k})-\hbar\omega_f. \quad (62,4)$$

Решение функциональных уравнений (62,3) и (62,40) с дополнительными соотношениями, выражающими закон сохранения энергии, выполняется по обычной схеме. При этом получается

$$\Phi_0=\frac{1}{e^{\frac{\varepsilon-\mu}{kT}}+1}, \qquad n_f=\frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}}-1}.$$

Зная равновесные функции распределения электронов и фононов и считая отклонение от равновесного состояния малым, можно решить интегро-дифференциальное уравнение (62,1).

## § 63. Решение кинетического уравнения

В дальнейшем мы ограничимся вычислением электропроводности металла при высокой температуре $T \gg \Theta$, где $\Theta$ — дебаевская температура. Аналогия между классическим и квантовым кинетическим уравнением для функции распределения электронов делает естественным применение для его интегрирования метода Лоренца. В стационарном однородном электрическом поле кинетическое уравнение можно написать как

$$\frac{e\mathscr{E}}{\hbar}\frac{\partial \Phi}{\partial \boldsymbol{k}} = I_{\text{столкн}}. \tag{63,1}$$

Его решение будем искать в виде

$$\Phi' = \Phi_0 + \Phi', \tag{63,2}$$

где поправка к функции распределения равна

$$\Phi'(\boldsymbol{k}) = \Phi_1(|\boldsymbol{k}|)\,\boldsymbol{k}_z = \Phi_1(|\boldsymbol{k}|)\,k\cos\vartheta, \tag{63,3}$$

а $\vartheta$ — угол между направлениями вектора $\boldsymbol{k}$ и полем $\mathscr{E}$.

При вычислении интеграла необходимо сделать некоторые допущения о виде функций $E(k)$ и $\omega_f$. Мы будем считать, что $\omega_f = cf$, где $c$ — скорость звука.

Будем, далее, полагать, что энергия электрона имеет вид см. (61,2)

$$E = \alpha k^2,$$

как это имеет место у квазисвободных электронов и у сильно связанных электронов вблизи края зоны.

Преобразуем интеграл столкновений в этих упрощающих предположениях, подставляя в него $\omega$, определенное формулой (47,16). При выполнении интегрирования введем полярные координаты с полярной осью, направленной по вектору $\boldsymbol{k}$.

Выпишем интеграл столкновений. Для сокращения формул ограничимся первой его частью, содержащей дельта-функцию, отвечающую процессу излучения:

$$I_{\text{столкн}} = \frac{4\pi}{9\hbar(2\pi)^3}\left(\frac{\hbar}{MN}\right) g^2 V(I_1 + I_2), \tag{63,4}$$

$$\begin{aligned} I_1 = \int \frac{f^2}{\omega_f}\{[\Phi_0(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{f}) + \Phi'(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{f})][1 - \Phi_0(\boldsymbol{k}) - \Phi'(\boldsymbol{k})](n_f+1) - \\ - [\Phi_0(\boldsymbol{k}) + \Phi'(\boldsymbol{k})][1 - \Phi_0(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{f}) - \Phi'(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{f})]\,n_f\} \times \\ \times \delta(E_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{f}} - E_{\boldsymbol{k}} - \hbar\omega_f)\,f^2\,df\,\sin\theta\,d\theta\,d\varphi. \end{aligned} \tag{63,5}$$

Далее мы воспользуемся условием равновесия (62,3) и (62,4) и пренебрежем произведениями функций $\Phi'(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{f})\,\Phi'(\boldsymbol{k})$.

Подставим в дельта-функцию выражение (61,2) для энергии:

$$I_1 = \int \frac{f^3}{c} \{\Phi'(\mathbf{k}+\mathbf{f})[1-\Phi_0(\mathbf{k})](n_f+1) - \Phi'(\mathbf{k})\Phi_0(\mathbf{k}+\mathbf{f})(n_f+1) - \\ - \Phi'(\mathbf{k})[1-\Phi_0(\mathbf{k}+\mathbf{f})]n_f + \Phi'(\mathbf{k}+\mathbf{f})\Phi_0(\mathbf{k})n_f\} \times \\ \times \delta(2\alpha kf\cos\theta + \alpha f^2 - \hbar cf)\sin\theta\, d\theta\, d\varphi\, df.$$

В дальнейшем мы ограничимся случаем высоких температур.

При высоких температурах $n_f \gg 1$. В этом предположении можно сделать замену

$$n_f + 1 \simeq n_f,$$

$$n_f \simeq \frac{(kT)}{\hbar cf}.$$

Напишем теперь разложение (63,2) более подробно. Именно, напишем:

$$\Phi(\mathbf{k}) = \Phi_0(E_{\mathbf{k}}) + k_{\mathscr{E}}\Phi_1(E_{\mathbf{k}}) = \Phi_0(E_{\mathbf{k}}) + k\cos\vartheta\Phi_1(E_{\mathbf{k}}),$$

$$\Phi(\mathbf{k}+\mathbf{f}) = \Phi_0(E_{\mathbf{k}+\mathbf{f}}) + k_{\mathscr{E}}\Phi_1(E_{\mathbf{k}+\mathbf{f}}) + f_{\mathscr{E}}\Phi_1(E_{\mathbf{k}+\mathbf{f}}) = \\ = \Phi_0(E_{\mathbf{k}} + \hbar\omega_f) + k\cos\vartheta\Phi_1(E_{\mathbf{k}} + \hbar\omega_f) + f\cos\gamma\Phi_1(E_{\mathbf{k}} + \hbar\omega_f).$$

Здесь $k_{\mathscr{E}}$ и $f_{\mathscr{E}}$ — проекции векторов $\mathbf{k}$ и $\mathbf{f}$ на направление электрического поля $\mathscr{E}$. Тогда найдем:

$$I_1 = \int \frac{f^2(kT)}{\hbar c^2}\{(k\cos\theta + f\cos\gamma)\Phi_1(E_{\mathbf{k}+\mathbf{f}}) - \\ - k\cos\vartheta\Phi_1(E_{\mathbf{k}})\}\delta(2\alpha kf\cos\theta + \alpha f^2 - \hbar cf)\sin\theta\, d\theta\, d\varphi\, df.$$

Поскольку $E_{\mathbf{k}+\mathbf{f}} = E_{\mathbf{k}} + \hbar\omega_f$, а энергия электрона порядка $E_{\text{макс}}$, можно положить

$$\Phi_1(E_{\mathbf{k}+\mathbf{f}}) \simeq \Phi_1(E_{\mathbf{k}}).$$

Поэтому

$$I_1 = \frac{(kT)}{\hbar c^2}\Phi_1(E_{\mathbf{k}})\int f^3\cos\gamma\,\delta(2\alpha kf\cos\theta + \alpha f^2 - \hbar cf)\sin\theta\, d\theta\, d\varphi\, df.$$

Для выполнения интегрирования по углам выразим $\cos\gamma$ через $\cos\theta$:

$$\cos\gamma = \cos\vartheta\cos\theta + \sin\vartheta\sin\theta\cos\varphi.$$

Тогда

$$I_1 = \frac{kT}{\hbar c^2}\Phi_1(E_{\mathbf{k}})\int f^3(\cos\theta\cos\vartheta + \sin\vartheta\sin\theta\sin\varphi) \times \\ \times \delta(2\alpha kf\cos\theta + \alpha f^2 - \hbar cf)\sin\theta\, d\theta\, d\varphi\, df = \\ = 2\pi\frac{kT}{\hbar c^2}\Phi_1(E_{\mathbf{k}})\cos\vartheta\int_0^\pi f^3\cos\theta\,\delta(2\alpha kf\cos\theta + \alpha f^2 - \hbar cf)\sin\theta\, d\theta\, df.$$

При интегрировании по $\varphi$ слагаемое, пропорциональное $\sin\varphi$, обратилось в нуль.

Интегрирование по углу $\theta$ можно провести, введя новую переменную

$$2\alpha kf\cos\theta+\alpha f^2-\hbar cf=u.$$

При таком преобразовании получаем:

$$I_1=\frac{2\pi(kT)}{\hbar c^2}\frac{\cos\vartheta}{2\alpha k}\Phi_1(E_k)\int f^2\,df\int_{u_1}^{u_2}\left(\frac{u}{2\alpha kf}+\frac{\hbar cf}{2\alpha kf}-\frac{\alpha f^2}{2\alpha kf}\right)\delta(u)\,du.$$

Как мы уже видели в § 61,

$$\int_{u_1}^{u_2}\delta(u)\,du=\int_{-\infty}^{+\infty}\delta(u)\,du=1.$$

Кроме того, поскольку при всех возможных значениях $f$, $u_1$ и $u_2$ имеют разные знаки,

$$\int_{u_1}^{u_2}u\delta(u)\,du=\int_{-\infty}^{+\infty}u\delta(u)\,du=0.$$

Учитывая эти равенства, получаем окончательно:

$$I_1=\frac{\pi kT}{\hbar c^2}\frac{\cos\vartheta\Phi_1(E_k)}{\alpha k}\int_0^{f_{\text{макс}}}\left(\frac{\hbar c}{2\alpha k}-\frac{\alpha f}{2\alpha k}\right)f^2\,df=$$

$$=\frac{(kT)}{\hbar c^2}\pi\frac{\cos\vartheta}{2\alpha k}\left(\frac{hcf^3_{\text{макс}}}{3\alpha k}-\frac{f^4_{\text{макс}}}{4k}\right)\Phi_1(E_k).$$

Вычисление второй части интеграла столкновений дает:

$$I_2=\int\frac{f^2}{\omega_f}\{[n_f(1-\Phi(\boldsymbol{k}))\Phi(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{f})-(n_f+1)\Phi(\boldsymbol{k})\times$$

$$\times(1-\Phi(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{f}))]\}\delta(E_{k-f}-E_k+\hbar\omega_f)\,d\boldsymbol{f}=$$

$$=\frac{\pi(kT)}{\hbar c^2}\frac{\cos\vartheta}{2\alpha k}\left(-\frac{\hbar cf^3_{\max}}{3\alpha k}-\frac{f^4_{\max}}{4k}\right)\Phi_1(E_k).$$

В силу (63,4) и выражений для $I_1$ и $I_2$ находим выражение для интеграла столкновений:

$$I_{\text{столкн}}=-\frac{\pi^2(kT)g^2f^4_{\max}}{9\hbar c^2(2\pi)^3\alpha k^2}\left(\frac{V}{MN}\right)\cos\vartheta\Phi_1(E_k). \qquad (63,6)$$

Преобразуем теперь левую часть кинетического уравнения. Считая силу $\boldsymbol{F}$, действующую на электрон, слабой, имеем

$$\boldsymbol{F}\frac{\partial\Phi_0}{\partial p}\simeq\frac{e\mathscr{E}}{\hbar}\frac{\partial\Phi_0}{\partial E_{\boldsymbol{k}}}\frac{\partial E_{\boldsymbol{k}}}{\partial\boldsymbol{k}}\frac{\partial\boldsymbol{k}}{\partial k_z}=\frac{e\mathscr{E}\cos\vartheta}{\hbar}2\alpha k\frac{\partial\Phi_0}{\partial E_{\boldsymbol{k}}}.$$

Приравнивая последнее выражение и $I_{\text{столкн}}$, получаем значение поправки к равновесной функции распределения:

$$\Phi_1=-e\mathscr{E}\frac{\partial\Phi_0}{\partial E_k}\left(\frac{18\alpha^2k^3(Mc^2)}{\pi^2(kT)g^2}\left(\frac{N}{V}\right)\frac{1}{f^4_{\text{макс}}}\right)(2\pi)^3. \qquad (63,7)$$

Сравнение (63,7) с (27,11) показывает, что

$$\lambda_{\text{ф}}=\frac{144\alpha^2k_0^4(Mc^2)\pi N}{(kT)g^2Vf^4_{\text{макс}}}. \qquad (63,8)$$

В соответствии с (80,13) ч. III, значение электронной энергии берется равной энергии Ферми:

$$\alpha k_0^2=\mu\simeq E_{\text{макс}},$$

где $\mu$ — парциальный потенциал равновесного распределения электрона.

Покажем далее, что результат, полученный для $\lambda_{\text{ф}}$, находится в согласии с формулой (61,7). Для этого напишем выражение для $\lambda_{\text{ф}}$ в виде

$$\lambda_{\text{ф}}=144\frac{E^2_{\text{эл}}}{g}\left(\frac{Mc^2}{g}\right)\frac{a}{\pi^3(kT)}\simeq 5\left(\frac{Mc^2}{g}\right)\frac{E_{\text{эл}}}{g}\frac{E_{\text{эл}}}{kT}a\simeq 5\frac{E_{\text{эл}}}{kT}a.$$

Это значение $\lambda_{\text{ф}}$ находится в очень хорошем согласии с полученными в § 61 качественными результатами.

Совершенно аналогичным образом может быть найдено решение кинетического уравнения для случая температур ниже дебаевской. При этом получается выражение для $\lambda_{\text{ф}}$, совпадающее с (61,12).

Мы не будем останавливаться на этих довольно громоздких вычислениях. Теория находится в хорошем согласии с опытом для металлов, имеющих кристаллическую решетку с высокой симметрией.

В металлах, обладающих решеткой с низкой симметрией, оказываются весьма существенными эффекты анизотропии. Различие между компонентами тензора $\sigma_{ik}$ в разных кристаллографических направлениях иногда оказываются и очень значительными. Для построения теории кинетических явлений с

учетом анизотропии необходимо более детально учесть характер поверхности Ферми[1]).

В случае металлов с относительно малым количеством примесей, или в случае сплавов с малой концентрацией одной из компонент или упорядоченных твердых растворов, приближения теории оказываются справедливыми.

Однако в сильно легированных металлах, неупорядоченных твердых растворах и в жидких металлах не выполнено основное допущение теории существования правильной периодической структуры.

Как мы указывали в § 39, электропроводность таких систем, рассчитывается с помощью аппарата временны́х коррелятивных функций.

## § 64. Сверхпроводимость

В предыдущих параграфах мы рассмотрели некоторые особенности металлических проводников. Наше рассмотрение было бы неполным, если бы мы не остановились вкратце на явлении сверхпроводимости. Макроскопическая теория сверхпроводимости обсуждалась ранее (§ 21 ч. IV). В последние годы удалось построить достаточно полную микроскопическую теорию сверхпроводимости, которую мы изложим здесь в общих чертах.

Уже сравнительно давно было высказано предположение о сходстве между явлениями сверхтекучести и сверхпроводимости. Именно, неослабляющийся омическим сопротивлением ток в сверхпроводнике естественно было уподобить сверхтекучему потоку электронов по решетке.

Сверхтекучесть, как это было выяснено в § 5, возникает в системе частиц, если энергетический спектр ее коллективных возбуждений удовлетворяет определенным требованиям. Эти требования не связаны непосредственно со статистикой частиц, из которых построена система. Однако спектр коллективных возбуждений, удовлетворяющий условию сверхтекучести, удавалось получить до последнего времени только для неидеального бозе-газа. Качественно понять причину этого можно из следующего рассуждения, которое позволяет уяснить различие между ферми- и бозе-системами.

Частицы бозе-газа в сверхпроводящем состоянии образуют конденсат, скапливаясь в состоянии с импульсом, равным нулю. Силы отталкивания между частицами обеспечивают появление в системе коллективного движения. Коллективные возбуждения в системе обладают энергетическим спектром, удовлетворяющим

---

[1]) И. М. Лифшиц, М. И. Каганов, УФН **69**, 419 (1959); **78**, 411 (1962); **87**, 389 (1965).

условию сверхтекучести (5,23). Малым импульсам возбуждения системы отвечает малая энергия.

В случае системы электронов — идеального газа ферми-частиц ситуация существенно изменяется. В такой системе невозможна конденсация частиц в пространстве импульсов. Частицы последовательно заполняют нижние квантовые состояния вплоть до уровня Ферми. Появление весьма малого возбуждения в такой системе означает, что одна из частиц покидает состояние на поверхности Ферми и переходит в незаполненное (возбужденное) состояние. В системе появляются две непарные «частицы» — электрон в незаполненном состоянии и дырка с импульсами, близкими к импульсу частиц на поверхности Ферми, т. е. с импульсами, имеющими очень большую абсолютную величину.

Таким образом, в системе ферми-частиц условие сверхтекучести $|v| < \frac{\varepsilon}{p}$ при малых $\varepsilon$ и больших $p$ не выполняется при сколько-нибудь заметной величине скорости. Электростатическое взаимодействие между ферми-частицами не может изменить это положение. В системе взаимодействующих ферми-частиц по-прежнему невозможна конденсация.

Электроны в металле образуют газ ферми-частиц, взаимодействующих между собой по закону Кулона, т. е. испытывающих взаимное отталкивание. Казалось непонятным, каким образом система электронов может двигаться, не взаимодействуя с кристаллической решеткой металла.

Одним из важных этапов в понимании природы сверхпроводимости было открытие изотопического эффекта (см. § 21 ч. IV). Из существования изотопического эффекта вытекало, что взаимодействие электронов с колебаниями решетки играет важную роль в явлении сверхпроводимости.

Интересно отметить в связи с этим, что в системах, обладающих хорошей проводимостью, как, например, металлы первой группы периодической системы Менделеева, сверхпроводимость не возникает. Наоборот, металлы, имеющие при обычной температуре значительно большее сопротивление, обладают свойством сверхпроводимости. Таким образом, явление сверхпроводимости наблюдается у металлов с относительно сильным взаимодействием между электронным и фононным газами.

Мы указывали уже в § 56 (см. рис. 51), что поглощение и испускание виртуальных фононов электронами приводит к некоторому эффективному взаимодействию между электронами. В 1956 г. появилась заметка Купера[1]), который указал, что благодаря существованию слабого взаимодействия (притяжения) между электронами они могут образовывать некоторые связанные

---

[1]) I. Bardeen, L. Cooper, I. Schieffer, Phys. Rev. **106**, 162 (1957).

состояния — пары электронов. Эти пары обладают целочисленным спином и, грубо говоря, их совокупность можно рассматривать как некоторый бозе-газ. Последний при низких температурах может обладать свойством сверхтекучести. Исходя из представления о парах, была построена теория явления сверхпроводимости Бардиным и Купером. Шиффером была построена полная теория сверхпроводимости. В наиболее строгой форме теория этого явления была дана Н. Н. Боголюбовым[1]).

Мы изложим вначале качественную картину образования электронных пар, следуя наглядному выводу Купера. Рассмотрим движение двух электронов. Волновую функцию системы представим в виде

$$\psi(\boldsymbol{R},\ \boldsymbol{r})=\frac{1}{\sqrt{V}}e^{i\boldsymbol{K}\boldsymbol{R}}\psi_0(\boldsymbol{r},\ \boldsymbol{K}), \tag{64,1}$$

где, в соответствии с (14,14) ч. V, волновая функция системы равна произведению волновых функций, характеризующих относительное движение и движение центра тяжести. Здесь $\boldsymbol{R}=\frac{\boldsymbol{r}_1+\boldsymbol{r}_2}{2}$: $\boldsymbol{r}=\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2$, $\boldsymbol{K}$ — волновой вектор всей системы как целого.

Волновую функцию относительного движения запишем в импульсном представлении

$$\psi_0=\sum_{k>k_0}a_k e^{i\boldsymbol{k}\boldsymbol{r}}. \tag{64,2}$$

Плоские волны нормируем на объем $V$ и наложим на них условия периодичности. Благодаря тому, что электронные состояния с энергией, меньшей энергии Ферми, заняты, суммирование в (64,2) соответственно ограничено снизу. Разумеется, такое ограничение суммирования снизу не является строго последовательной операцией. В действительности нужно рассматривать многоэлектронную задачу. Купер сводит эту проблему к задаче двух взаимодействующих электронов на фоне заполненной ферми-сферы. Учет электронов фона производится в форме ограничения при суммировании, т. е. в выражении (64,2) полагается $a_k=0$ при $k<k_0$.

Уравнение Шредингера для двух частиц в импульсном представлении имеет вид [ср. (48,12′) ч. V]

$$(\mathscr{E}_K+\varepsilon_k-E)\,a_k+\sum_{k'}a_{k'}(\boldsymbol{k}\,|\,H'\,|\,\boldsymbol{k}')=0, \tag{64,3}$$

---

[1]) Н. Н. Боголюбов, В. В. Толмачев и Д. В. Ширков, Новый метод в теории электропроводности, изд. АН СССР, 1958; Д. Бардин, Д. Шрифер. Новое в изучении сверхпроводимости, Физматгиз, 1962; Д. Шрифер, Теория сверхпроводимости, «Наука», 1970; Э. Линтон, Сверхпроводимость, «Мир», 1964.

где

$$(\boldsymbol{k}\,|\,H'\,|\,\boldsymbol{k}') = \frac{1}{V}\int d\boldsymbol{r}e^{-i\boldsymbol{k}\boldsymbol{r}}\hat{H}'e^{i\boldsymbol{k}'\boldsymbol{r}}$$

и

$$\mathscr{E}_K = \frac{\hbar^2K^2}{4m}, \qquad \varepsilon_k = \frac{\hbar^2k^2}{m}. \tag{64,4}$$

Как уже упоминалось, поглощение и испускание фононов электронами приводит к некоторому эффективному взаимодействию между ними. Это взаимодействие аналогично кулоновскому взаимодействию в электродинамике, обусловленному обменом фотонами.

Обменное взаимодействие могло бы быть получено с помощью гамильтониана (55,11). Однако вывод, основанный на гамильтониане (55,11), является сложным. Поэтому мы рассмотрим упрощенный гамильтониан, позволяющий правильно сделать основные качественные выводы, не требующие выполнения сложных выкладок. Положим:

$$(\boldsymbol{k}\,|\,H'\,|\,\boldsymbol{k}') = -F, \quad \text{если} \quad k_0 \leqslant k,\ k' \leqslant k_m, \quad \text{где} \quad k_0 < k_m. \tag{64,5}$$

$(\boldsymbol{k}|H|\boldsymbol{k}') = 0$, если $k$ или $k'$ лежит вне указанной области. Здесь $F$ — некоторая постоянная ($F > 0$) и $\frac{\hbar_2}{m}(k_m^2 - k_0^2) \approx 2\hbar\omega \approx$ $\approx 0{,}2$ *эв* ($\hbar\omega$ порядка некоторой эффективной энергии фонона и $\varepsilon_0 = \frac{\hbar^2 k_0^2}{m}$ — энергия электрона на поверхности Ферми).

Подставляем выражение (64,5) в уравнение (64,3). Тогда имеем

$$a_k = \frac{F\sum\limits_{k'} a_{k'}}{\mathscr{E}_K + \varepsilon_K - E}, \qquad k_0 < k < k_m \tag{64,6}$$

и $a_k = 0$ для $k$, лежащих вне указанного интервала. Вычислим далее сумму $\sum\limits_k a_k$. Она равна

$$\sum_k a_k = F\sum_k \frac{\sum\limits_{k'} a_{k'}}{\mathscr{E}_K + \varepsilon_k - E}, \tag{64,7}$$

откуда получаем:

$$1 = -F\int\limits_{\varepsilon_0}^{\varepsilon_m} \frac{N(K,\varepsilon)\,d\varepsilon}{E - \mathscr{E}_K - \varepsilon}. \tag{64,8}$$

Здесь энергии $\varepsilon_0$ и $\varepsilon_m$ соответствуют импульсы $k_0$ и $k_m$ и от суммирования мы перешли к интегрированию по соответствующему энергетическому интервалу. $N(K, \varepsilon)$ обозначает плотность

двухэлектронных состояний с энергией $\varepsilon$ и полным импульсом $K$. Уравнение (64,8) определяет энергию системы $E$. Плотность состояний $N(K, \varepsilon)$ благодаря узости интервала энергий, в котором осуществляется взаимодействие, можно заменить на $N(K, \varepsilon_0)$. После этого интегрирование проводится элементарно. Разрешая полученное уравнение относительно $E$, имеем

$$E = E_0 = \mathscr{E}_K + \varepsilon_0 - \Delta,$$

где

$$\Delta = \frac{\varepsilon_m - \varepsilon_0}{e^{1/\beta} - 1} \qquad (64,9)$$

и

$$\beta = N(K, \varepsilon_0) F. \qquad (64,10)$$

Найденное состояние с энергией $E = E_0$, очевидно, отвечает связанному состоянию. Действительно, уравнение (64,8) имеет решение только при определенном значении $E$. Можно заметить, что непрерывный спектр, отвечающий распаду пары, отделен от уровня энергии связанного состояния щелью шириной $\Delta$. Величина $\Delta$ сильно зависит от числа состояния $N(K, \varepsilon_0)$. Функция $N$ в свою очередь резко зависит от полного импульса пары $K$. Для того чтобы проиллюстрировать эту зависимость, рассмотрим рис. 52. Центры сфер Ферми радиуса $k_0$ двух электронов отстоят друг от друга на величину полного импульса $K$ системы. Величина $\delta k$ соответствует той области в импульсном пространстве, в которой осуществляется взаимодействие. Поскольку суммарный импульс электронов равняется $K$, а каждый из импульсов отдельных электронов должен лежать в области $\delta k$, то очевидно, что объем заштрихованной области пропорционален числу состояний $N(K, \varepsilon_0)$. Отсюда видно, что $N(K, \varepsilon_0)$ имеет резкий пик при полном импульсе, равном нулю. В этом случае сферы совмещаются и объем заштрихованной области становится максимальным. Это приводит к тому, что фактически в пары связываются электроны с противоположными импульсами. Таким образом, даже при очень слабом взаимодействии возникает связанное состояние системы двух электронов. Заметим, что, вообще говоря, две микрочастицы могут образовать связанные состояния только при достаточно сильном взаимодействии. Так, в § 37 ч. V мы показали, что в сферической потенциальной яме может образовываться уровень, отвечающий связанному состоянию, только при условии, что глубина потенциальной ямы больше некоторого критического значения.

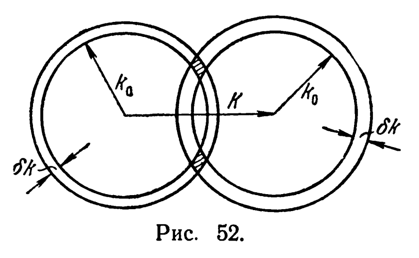


Рис. 52.

В данном случае связанное состояние могло бы образоваться при сколь угодно слабом взаимодействии (малом $F$). Формально это произошло потому, что суммирование в (64,2) ограничено условием $k > k_0$, фактически это связано с влиянием электронов фона.

Итак, в металле может происходить спаривание электронов. Электронные пары имеют целочисленный спин и подчиняются статистике Бозе. Неидеальный бозе-газ обладает свойством сверхтекучести. Так как пары заряжены, то сверхтекучее движение электронов соответствует появлению сверхпроводимости. Заметим, что функцию (64,9) нельзя разложить в ряд около точки $\beta = 0$, а следовательно, никакие расчеты, построенные на основе теории возмущений, не могли привести к выяснению явления сверхпроводимости.

Явление спаривания электронов особенно наглядно проявляется в поведении двусвязных (полых) сверхпроводников в магнитном поле.

Рассмотрим полый сверхпроводящий цилиндр, помещенный в однородное внешнее магнитное поле, направленное вдоль его оси. Нас будет интересовать волновая функция $\varphi_H(\boldsymbol{R})$, характеризующая движение центра тяжести пары электронов в магнитном поле. Внутреннее движение компонент пары мы при этом не учитываем.

Поскольку спин пары равен нулю, а заряд и масса равны удвоенным значениям этих величин для одного электрона, уравнение для одного электрона, уравнение Паули для пары можно представить в виде

$$\frac{1}{4m}\left[\frac{h}{i}\nabla - \frac{2e}{c}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r})\right]^2 \varphi_H = E\varphi_H. \tag{64,11}$$

Напомним, что при наложении магнитного поля на поверхности сверхпроводника возбуждается сверхпроводящий ток, полностью экранирующий внешнее магнитное поле. Поэтому внутри сверхпроводника всегда

$$\boldsymbol{H} = \operatorname{rot}\boldsymbol{A} = 0.$$

Это значит, что вектор-потенциал $\boldsymbol{A}$ в полом цилиндра может быть представлен в виде

$$\boldsymbol{A} = \operatorname{grad}\chi(\boldsymbol{r}), \tag{64,12}$$

где $\chi$ — скалярный потенциал магнитного поля, являющийся неоднозначной функцией координат.

Магнитный поток через полость в цилиндре равен

$$\Phi = \int \boldsymbol{H}\,d\boldsymbol{S} = \int \operatorname{rot}\boldsymbol{A}\,d\boldsymbol{S} = \oint \boldsymbol{A}\,d\boldsymbol{r} = \int \operatorname{grad}\chi\,d\boldsymbol{r} = \Delta\chi, \tag{64,13}$$

где $\Delta\chi$ — скачок функции $\chi$ при обходе по замкнутому контуру внутри сверхпроводящего цилиндра.

Пользуясь выражением (64,12), можно переписать уравнение (64,11) в виде

$$\frac{1}{4m}\left[\frac{\hbar}{i}\nabla-\frac{2e}{c}\operatorname{grad}\chi(\boldsymbol{r})\right]^2\varphi_H=E\varphi_H. \qquad (64,14)$$

Нетрудно убедиться, что волновая функция пары в магнитном поле $\varphi_H$ выражается через волновую функцию пары $\varphi_0$ без магнитного поля соотношением

$$\varphi_H=\varphi_0 e^{-\frac{2ie}{\hbar c}\chi(\boldsymbol{r})}=\frac{1}{\sqrt{V}}e^{iKr-\frac{2ie}{\hbar c}\chi(\boldsymbol{r})}. \qquad (64,15)$$

Разумеется, что волновая функция $\varphi_H$, как и волновая функция $\varphi_0$, должна быть однозначной функцией координат.

Мысленно переместим какую-либо пару внутри сверхпроводника по произвольной замкнутой кривой. При таком переносе не могут измениться ни функция $\varphi_0$, ни функция $\varphi_H$. Между тем согласно (64,15) неоднозначная функция $\chi(\boldsymbol{r})$ изменяется при обходе замкнутого контура на величину $\Delta\chi$. Для того чтобы волновая функция $\varphi_H$ не изменялась при возрастании $\chi$ на величину $\Delta\chi$, необходимо, чтобы выполнялось равенство

$$\frac{2e}{\hbar c}\Delta\chi=\frac{2e\Phi}{\hbar c}=2\pi n,$$

где $n=0,\ \pm1,\ \pm2,\ldots$ Таким образом, магнитный поток через полость цилиндра может пробегать дискретный ряд значений

$$\Delta\Phi=\frac{\hbar c}{2e}(2\pi n), \qquad (64,16)$$

кратных величине $\frac{\hbar c}{2e}$ и зависящих от заряда $(2e)$. Полный магнитный поток через полость получается путем умножения $\Delta\Phi$ на число пар в объеме сверхпроводящего цилиндра.

Как самый факт квантования магнитного потока через полость цилиндра, так и его зависимость от заряда пары $(2e)$ были полностью подтверждены на опыте.

Проведенное выше качественное рассмотрение явления сверхпроводимости полезно дополнить более последовательным обсуждением свойств некоторой упрощенной модельной системы, описываемой гамильтонианом,

$$H=\sum[\varepsilon(p)-\mu]\left(\hat{a}^+_{p\uparrow}\hat{a}_{p\uparrow}+\hat{a}^+_{p\downarrow}\hat{a}_{p\downarrow}\right)+\Delta\sum\left(\hat{a}_{p\uparrow}\hat{a}_{-p\downarrow}+\hat{a}^+_{-p\downarrow}\hat{a}^+_{p\uparrow}\right), \qquad (64,17)$$

где

$$\varepsilon(p)=\frac{p^2}{2m}=vp$$

— энергия электрона с импульсом $p$,

$$\mu = \frac{p_0^2}{2m}$$

— химический потенциал и $p_0$ импульс на поверхности Ферми. В гамильтониане (64,17) первое слагаемое представляет гамильтониан системы невзаимодействующих частиц, находящихся вне поверхности Ферми.

Вторая сумма характеризует взаимодействие электронов, находящихся вне поверхности Ферми с конденсатом, т. е. с электронами в заполненных состояниях.

Это взаимодействие приводит к порождению или уничтожению пар электронов с противоположно направленными импульсами и спинами.

Величина $\Delta$, по причинам, ясным из дальнейшего, именуемая энергетической щелью, представляет работу выхода пары из конденсата на поверхность Ферми.

При выборе гамильтониана (64,17) мы воспользовались тем, что число частиц в конденсате велико. Поэтому мы, подобно тому как это было сделано в § 5, вместо четырехфермионного оператора взаимодействия, фигурирующего в гамильтониане (5,3), ввели упрощенные двухфермионные операторы: оператор $\hat{a}_{p\uparrow}\hat{a}_{-p\downarrow}$, описывающий уничтожение двух электронов с импульсом $p$ и спином $\uparrow$ и с импульсом $(-p)$ и спином $\downarrow$, а также оператор $\hat{a}^+_{p\uparrow}$, описывающий рождение такой пары.

Произведем над гамильтонианом (64,17) линейное преобразование, переходя от операторов $\hat{a}$ и $\hat{a}^+$ к новым операторам $\hat{\alpha}$ и $\hat{\alpha}^+$, аналогичное проделанному в § 5.

Именно, положим

$$\hat{a}_{p\uparrow} = u_p\hat{\alpha}_{p\uparrow} + v_p\alpha^+_{-p\downarrow}, \tag{64,18}$$

$$\hat{a}^+_{p\downarrow} = u_p\hat{\alpha}^+_{p\downarrow} - v_p\hat{\alpha}_{-p\downarrow}. \tag{64,19}$$

Здесь $u_p$ и $v_p$ — коэффициенты преобразования, которые считаются действительными $c$-числами, так что

$$u_p = u_{-p};\qquad v_p = v_{-p}.$$

Кроме того, считается, что коэффициенты $u_p$ и $v_p$ удовлетворяют условию

$$u_p^2 + v_p^2 = 1. \tag{64,20}$$

Формулами (64,18) и (64,19) коэффициенты $u_p$ и $v_p$ определены еще не полностью и мы в дальнейшем можем наложить на них еще одно условие по нашему произволу. Легко непосредственно убедиться, что преобразования (64,18)—(64,19) являются

каноническими, т. е. что новые операторы $\hat{\alpha}$ и $\hat{\alpha}^+$, так же как и старые операторы $\hat{a}$ и $\hat{a}^+$, удовлетворяют фермиевским перестановочным соотношениям. Подставляя в гамильтониан (64,17) и преобразовывая его к новым ферми-операторы, получаем с учетом (64,20)

$$H = 2\sum [\varepsilon(p)-\mu]\, v_p^2 - 2\Delta \sum u_p v_p +$$
$$+ \sum \left\{ \left[ [\varepsilon(p)-\mu]\left(u_p^2 - v_p^2\right) + 2\Delta u_p v_p \right] \cdot \left( \hat{\alpha}^+_{p\uparrow} \hat{\alpha}_{-p\downarrow} + \hat{\alpha}^+_{p\downarrow} \hat{\alpha}_{-p\uparrow} \right) \right\} +$$
$$+ \sum \left\{ [\varepsilon(p)-\mu]\, 2u_p v_p - \Delta\left(u_p^2 - v_p^2\right) \right] \left( \hat{\alpha}^+_{p\uparrow} \hat{\alpha}^+_{p\uparrow} + \alpha_{p\downarrow} \alpha_{p\downarrow} \right) \right\}.$$

Потребуем теперь, чтобы коэффициенты $u_p$ и $v_p$ удовлетворяли условию

$$2[\varepsilon(p)-\mu]\, u_p v_p - \Delta\left(u_p^2 - v_p^2\right) = 0.$$

Тогда выражение для $H$ существенно упростится и примет вид

$$H = E_0 + \sum E(p)\left( \hat{\alpha}^+_{p\uparrow} \hat{\alpha}_{-p\uparrow} + \hat{\alpha}^+_{-p\downarrow} \hat{\alpha}_{p\uparrow} \right), \qquad (64,21)$$

где обозначено

$$E_0 = 2\sum \left\{ [\varepsilon(p)-\mu]\, v_p^2 - \Delta u_p v_p \right\}, \qquad (64,22)$$

$$E(p) = [\varepsilon(p)-\mu]\left(u_p^2 - v_p^2\right) + 2\Delta u_p v_p. \qquad (64,23)$$

Гамильтониан (64,21) допускает наглядную трактовку.

Он отвечает газу элементарных возбуждений. Элементарные возбуждения обладают энергией $E(p)$ и связаны с движением двух фермионов с импульсами соответственно $(p)$ и $(-p)$. Значение $E(p)$ может быть выражено через $\varepsilon(p)$, $\mu$ и $\Delta$, если решить уравнения (64,22) и (64,23) для $u_p$ и $v_p$

Имеем очевидно, из (64,22), (64,21) и (64,20)

$$u_p^2 = \frac{1}{2}\left(1 + \frac{\varepsilon(p)-\mu}{\varepsilon(p)}\right), \qquad v_p^2 = \frac{1}{2}\left(1 - \frac{\varepsilon(p)-\mu}{\varepsilon(p)}\right).$$

Подставляя значения $u_p$ и $v_p$ в (64,23) для $E(p)$, получаем

$$E(p) = \sqrt{[\varepsilon(p)-\mu]^2 + \Delta^2}. \qquad (64,24)$$

Таким образом, минимальная энергия элементарных возбуждений (при $\varepsilon(p)=\mu$) оказывается равной $\Delta$. Щель шириной $\Delta$ отделяет энергию элементарного возбуждения от энергии частиц на поверхности фаз. Вблизи поверхности Ферми можно представить $E(p)$ в виде

$$E(p) = \sqrt{v^2(p-p_F)^2 + \Delta^2}. \qquad (64,25)$$

Газ элементарных возбуждений со спектром, даваемым формулами (64,21) и (64,25), как мы видели в § 5, обнаруживает свойство сверхтекучести.

Поскольку в рассматриваемом случае речь идет об элементарных возбуждениях, движение которых связано с переносом заряда, ясно, что мы пришли к выводу о наличии у него сверхпроводимости.

Следует еще заметить, что взаимодействие посредством парного обмена фононов, по-видимому, не является единственным типом взаимодействия между электронами, ответственными за сверхпроводимость. Указание на это дает тот факт, что существуют сверхпроводники (рутений, осмий), не обнаруживающие изотопического эффекта. Однако из предыдущих расчетов видно, что существующая теория сверхпроводимости не очень чувствительна к детальному характеру сил взаимодействия (притяжения) между электронами, ответственному за появление свойства сверхпроводимости.

## § 65. Теория ферми-жидкости

Несколько лет назад Л. Д. Ландау была предложена феноменологическая теория ферми-жидкости, в которой с самого начала предполагается существование сильного взаимодействия между ферми-частицами. Эта теория позднее получила статистическое обоснование, которое слишком сложно для того, чтобы его можно было изложить в этой книге[1]).

Эта теория была применена к описанию поведения изотопа жидкого гелия $He^3$, ядра которого имеют спин 1/2 и должны подчиняться статистике Ферми. Если высказать предположение, что энергетический спектр системы электронов в кристаллической решетке сравнительно мало отличается от спектра электронной жидкости, заполняющей соответствующий объем, то она в равной мере относится и к электронам в металлах.

В основу теории положено допущение, что как бы ни было сильно взаимодействие между частицами, оно не может нарушить принципа запрета. Поэтому числа заполнения энергетических состояний в жидкости, как и в газе, могут быть равны только нулю и единице. Это означает, что в ферми-жидкости при абсолютном нуле заполнены все энергетические уровни вплоть до некоторой граничной поверхности Ферми.

Распределение по энергиям имеет характер ступенчатой функции,

$$f=\begin{cases} 0 & \varepsilon>\varepsilon_F, \\ 1 & \varepsilon<\varepsilon_F. \end{cases}$$

[1]) См А. А. Абрикосов, Л. П. Горьков, И. Е. Дзялошинский, Методы квантовой теории поля в статистической физике, Физматгиз, 1962. В своем изложении теории ферми-жидкости мы следуем этой книге.

Энергия и импульс на поверхности Ферми связаны с числом частиц соотношением (см. § 79 ч. III)

$$\varepsilon_F = \frac{p_F^2}{2m} = \frac{(2\pi\hbar)^2}{2m}\left(\frac{3}{8\pi}\frac{N}{V}\right)^{2/3}. \qquad (65,1)$$

При температуре отличной от нуля, но достаточно низкой, возникают коллективные возбуждения и ступенчатое распределение несколько размыкается. Если температура является достаточно низкой, то можно считать, что энергия этих возбуждений близка к граничной энергии $\varepsilon_F$.

Появление возбуждения всегда сопровождается образованием свободных вакансий — дырок в заполненных состояниях внутри поверхности Ферми. Исчезновение возбуждений связано с заполнением вакантных состояний — аннигиляций «дырок» и «частиц». Поэтому можно утверждать, что возбуждения возникают и исчезают попарно.

Если отсчитывать энергию возбуждений от поверхности Ферми и приписывать возбуждениям определенное значение импульса, то их можно трактовать как пару квазичастиц — собственно квазичастицу и дырку.

Энергия возбуждений при малых возбуждениях может быть представлена в виде разложения по малому параметру $(p - p_F)$

$$\varepsilon = \varepsilon_F + \left(\frac{\partial\varepsilon}{\partial p}\right)_{p_F}(p - p_F). \qquad (65,2)$$

Аналогично, энергия дырки (отсчитываемая, как всегда, вниз от поверхности Ферми)

$$-\varepsilon = \varepsilon_F + \left(\frac{\partial\varepsilon}{\partial p}\right)_{p_F}(p_F - p). \qquad (65,3)$$

В соответствии с общими положениями теории квазичастиц, оба вида частиц равноправны и их свойства могут описываться величиной

$$\left(\frac{\partial\varepsilon}{\partial p}\right)_{p=p_0} = \frac{p_0}{m^*}, \qquad (65,4)$$

где $m^*$ — эффективная масса.

При низких температурах ширина интервала размытости распределения, т. е. ширина интервала,

$$(\varepsilon - \varepsilon_F) \sim kT. \qquad (65,5)$$

Для того чтобы приближение свободных квазичастиц имело смысл, необходимо, чтобы имело смысл понятие импульса, т. е. выполнялось условие (47,20).

Поскольку в ферми-жидкости возбуждения могут возникать и исчезать только попарно, число встреч пары «частица» —

«дырка» пропорционально $N^2$, где $N$ — полное число возбуждений при данной температуре.

При низких температурах последнее растет пропорционально $T$. Соответственно этому, время жизни возбуждений

$$\tau \sim \frac{1}{N^2} \sim \frac{1}{T^2}. \qquad (65,6)$$

Поэтому $\Delta\varepsilon$ — неопределенность в энергии квазичастицы согласно (65,6) равна

$$\Delta\varepsilon \sim \hbar T^2 \sim \frac{\hbar}{\tau}. \qquad (65,7)$$

Сравнивая (65,7) и (65,5), мы видим, что при достаточно низкой температуре всегда

$$(\varepsilon - \varepsilon_F) \gg \Delta\varepsilon, \qquad (65,8)$$

и понятие импульса независимых квазичастиц имеет смысл. Таким образом, квазичастицы в ферми-жидкости имеют импульс и эффективную массу. Они возникают или исчезают только попарно при редких соударениях и, следовательно, подчиняются принципу запрета.

Перечисленные свойства элементарных возбуждений позволяют трактовать их как ферми-систему, описываемую функцией распределения:

$$f(\varepsilon) = \frac{1}{e^{\frac{\varepsilon-\varepsilon_F}{kT}} + 1}. \qquad (65,9)$$

Функцию распределения квазичастиц мы будем нормировать условием

$$\int f(\varepsilon) \frac{d\Gamma}{(2\pi\hbar)^3} = \frac{N}{V}, \qquad (65,10)$$

где $N$ — число реальных частиц жидкости в объеме $V$.

Однако, и в этом существенное отличие ферми-жидкости от ферми-газа, энергия $\varepsilon$ данной квазичастицы зависит от плотности $n(\varepsilon)$, а следовательно, и от температуры.

В приближении самосогласованного поля каждая квазичастица движется в поле, создаваемом всеми остальными квазичастицами. Поэтому, если функция распределения возбуждений изменится на величину $\delta f$, соответственно изменится и энергия квазичастицы. Это изменение можно представить как

$$\delta\varepsilon = \int F(\boldsymbol{p}, \boldsymbol{p}')\, \delta f(\boldsymbol{p}') \frac{d\boldsymbol{p}'}{(2\pi\hbar)^3}, \qquad (65,11)$$

где оператор $F(p, p')$ описывает интересующее нас изменение[1]). Этот формально введенный оператор играет основную роль в

[1]) Для упрощения формул мы не выписываем здесь зависимости оператора $F$ от спинов.

теории ферми-жидкости. Формула (65,11) показывает, что энергия $\varepsilon$ является функционалом от распределения $f$.

Свойства распределения Ферми определяют температурную зависимость термодинамических величин газа квазичастиц. Именно, пользуясь формулами § 80 ч. III, имеем

$$E = \int \frac{\varepsilon}{e^{\frac{\varepsilon-\mu}{kT}}+1} \frac{d\Gamma}{(2\pi\hbar)^3} \simeq \frac{3N\varepsilon_F}{5}\left[1+\frac{5}{12}\pi^2\left(\frac{kT}{\varepsilon_F}\right)^2\right] \qquad (65,12)$$

и

$$C_V = kN\frac{\pi^2 kT}{\varepsilon_F}. \qquad (65,13)$$

Линейная температурная зависимость теплоемкости связана исключительно со ступенчатым характером фермиевского распределения. Более примечательными оказываются кинетические свойства ферми-жидкости. Именно, согласно (65,6) длина свободного пробега квазичастиц

$$\lambda \sim v_F\tau \sim \frac{v_F}{T^2} \qquad (65,14)$$

и быстро растет с понижением температуры. Это обстоятельство определяет температурную зависимость кинетических коэффициентов, возрастающих с понижением температуры. Так, например, вязкость, по порядку величины, равна

$$\eta \sim (m^* v_F)\, n\lambda \sim \frac{1}{T^2} \qquad (65,15)$$

а теплопроводность соответственно

$$\varkappa \sim (C_V n)\, v_F\lambda \sim \frac{1}{T}. \qquad (65,16)$$

Большая длина свободного пробега квазичастиц делает невозможным распространение в ферми-жидкости обычного звука. Как мы видели в § 26, при длинах волн, превышающих длину свободного пробега, в среде начинается весьма резкое затухание звуковых волн.

Оказывается, однако, что в ферми-жидкости могут распространяться периодические возмущения высокой частоты $\omega > \frac{1}{\tau}$, имеющие характер, принципиально отличный от обычных звуковых волн.

Напишем кинетическое уравнение для неравновесной функции распределения

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \boldsymbol{v}\frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{r}} + \boldsymbol{F}\frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{p}} = J \qquad (65,17)$$

и заменим в нем

$$F = -\frac{\partial \varepsilon}{\partial \boldsymbol{r}}. \qquad (65,18)$$

Тогда кинетическое уравнение примет вид

$$\frac{\partial f}{\partial t}+\boldsymbol{v}\frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{r}}-\frac{\partial \varepsilon}{\partial \boldsymbol{r}}\frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{p}}=J. \qquad (65,19)$$

Интеграл столкновений $J\sim\frac{1}{\tau}$ и при достаточно низких температурах мал. Иными словами, при достаточно низких температурах столкновения между квазичастицами становятся столь редкими, что их влияние на изменение функции распределения мало́.

В этих условиях в идеальном газе передача возмущений прекращается. Существующее в ферми-жидкости взаимодействие приводит, как видно из (65,12), к изменению энергии квазичастиц при изменении функции распределения. Это — своеобразный вид дальнодействия между частицами в ферми-жидкости. Благодаря силам дальнодействия, возникшее в некоторый момент времени возмущение функции распределения распространяется по всей жидкости.

Положим в кинетическом уравнении

$$f=f_0(\varepsilon)+f_1(\boldsymbol{p}), \qquad (65,20)$$

где $f_0(\varepsilon)$ — равновесное распределение, а $f_1$ — возмущение.

Подставляя (65,20) в кинетическое уравнение, находим

$$\frac{\partial f_1}{\partial t}+\boldsymbol{v}\frac{\partial f_1}{\partial \boldsymbol{r}}-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon}\frac{\partial \varepsilon}{\partial \boldsymbol{p}}\frac{\partial \varepsilon}{\partial \boldsymbol{r}}=0. \qquad (65,21)$$

Заметим, что в равновесной жидкости $\frac{\partial \varepsilon}{\partial \boldsymbol{r}}=0$. Поэтому в последнем члене мы удержали лишь величину первого порядка малости. Поскольку равновесное распределение $f_0$ имеет вид ступенчатой функции, имеем (ср. § 80 ч. III)

$$\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon}=-\delta(\varepsilon-\varepsilon_F).$$

Поэтому возмущение $f_1$ также должно быть пропорционально этой дельта-функции. Будем искать его в виде

$$f_1\sim\alpha\delta(\varepsilon-\varepsilon_F)\,e^{i(\boldsymbol{kr}-\omega t)}. \qquad (65,22)$$

Выбрав вектор $\boldsymbol{k}$ за полярную ось и считая, что $\alpha$ зависит только от угла $\theta$, получаем

$$i(v_Fk\cos\theta-\omega)\alpha+\boldsymbol{v}\frac{\partial \varepsilon}{\partial \boldsymbol{r}}=0. \qquad (65,23)$$

Для изменения энергии $\frac{\partial \varepsilon}{\partial \boldsymbol{r}}$, пользуясь (65,11), можно написать

$$\frac{\partial \varepsilon}{\partial \boldsymbol{r}}=\int F(\boldsymbol{p},\boldsymbol{p}')\frac{\partial f_1(\boldsymbol{p}')}{\partial \boldsymbol{r}}\frac{d\boldsymbol{p}'}{(2\pi\hbar)^3}=i\boldsymbol{k}\int F(\boldsymbol{p},\boldsymbol{p}')f_1(\boldsymbol{p}')\int\frac{d\boldsymbol{p}'}{(2\pi\hbar)^3}. \qquad (65,24)$$

При подстановке (65,24) в уравнение (65,23) следует взять значения импульса на поверхности Ферми, так что интегрирование по $dp$ сводится к интегрированию по углам. Таким образом, получаем

$$(kv_F \cos\theta - \omega)\,\alpha(\theta) + \frac{kv_F \cos\theta\, p_F^3}{3(2\pi\hbar)^3} \int F\alpha(\theta')\,d\Omega = 0. \qquad (65,25)$$

Зависимость $F$ от угла неизвестна. Если принять, что $F$ вообще от углов не зависит и является некоторой постоянной, то

$$\int F(p,\ p')\,\alpha(\theta')\,d\Omega = F\int \alpha(\theta')\,d\Omega = \mathrm{const} = A$$

и

$$\left(\frac{\omega}{kv_F} - \cos\theta\right)\alpha(\theta) = A\cos\theta$$

или

$$\alpha(\theta) = \frac{A\cos\theta}{\left(\dfrac{\omega}{kv} - \cos\theta\right)}. \qquad (65,26)$$

Подставляя это значение $\alpha$ в (66,26), получаем уравнение для определения $\frac{\omega}{kv} = \frac{u}{v}$, где $u$ — скорость распределения возмущений:

$$\frac{u}{v_F}\ln\left(\frac{\dfrac{u}{v_F} + 1}{\dfrac{u}{v_F} - 1}\right) = 1 + \frac{1}{A} = 1 + \frac{3(2\pi\hbar)^3}{2\pi F p_F^3}. \qquad (65,27)$$

Из последнего выражения непосредственно видно, что скорость распределения возмущений может быть вещественной только, если она превышает скорость частиц на поверхности Ферми $v_F = \frac{p_F}{m^*}$. При этом, как видно из (65,26), возмущенная функция распределения оказывается вытянутой вперед по направлению распространения возмущения.

Полученный результат, как показывает более подробное рассмотрение, имеет общий характер и не связан с принятым упрощением $F = \mathrm{const}$. Учет угловой зависимости $F$ приводит к еще более асимметричному распределению возмущенной функции.

Распространение рассмотренных возмущений является специфическим эффектом, связанным с взаимодействием квазичастиц. Этот эффект получил название «нулевого звука», поскольку он может распространяться при $T = 0$. Ясно, что нулевой звук представляет существенно неравновесный процесс. Более полный расчет показывает, что распространение нулевого звука сопровождается его быстрым затуханием по длине $\sim u\tau$.

В самое последнее время существование «нулевого звука» получило полное экспериментальное подтверждение. В жидком гелии $He^3$ наблюдалось распространение и затухание нулевого звука, возбуждавшегося колебаниями стенок сосуда. Опыт подтвердил все основные выводы теории.

Свойства электронной ферми-жидкости во многих отношениях оказываются сходными со свойствами ферми-жидкости нейтральных частиц. Это относится к общему характеру возникновения возбуждений, ввиду энергетического спектра и т. п. Вместе с тем наличие кулоновского взаимодействия и взаимодействия с фононами решетки приводит к появлению довольно существенных, хотя и количественных различий. Теория электронной ферми-жидкости слишком сложна и неполно разработана для того, чтобы ее можно было излагать в рамках этой книги.

## § 66. Электроны в кристаллах диэлектриков

Как мы подчеркивали, различие между металлами, полупроводниками и диэлектриками связано главным образом с разным характером электронного спектра.

В кристаллах диэлектриков свободная зона отделена от заполненной зоны широкой (порядка одного или нескольких электрон-вольт) полосой запрещенных энергий.

Допустим, что в диэлектрике происходит поглощение света и возбуждение одного из атомов решетки. Поскольку кристалл обладает трансляционной симметрией и волновая функция возбужденного состояния $\psi_n$ должна удовлетворять условию трансляционной симметрии

$$T\psi_n = \alpha_n \psi_n, \tag{66,1}$$

состояние возбуждения не может быть локализовано у определенного атома. Наоборот, оно должно двигаться по кристаллу и представлять возбужденное состояние кристалла как целого. Электронная волновая функция, описывающая кристалл в возбужденном состоянии, может быть представлена в виде (ср. 48,11)

$$\Psi = \sum e^{i\boldsymbol{kr}} \varphi_j, \tag{66,2}$$

где $\varphi_j$ — симметризованная волновая функция, отвечающая возбуждению $j$-го атома в решетке. Волновая функция (66,2) удовлетворяет как уравнению Шредингера [при должном выборе $E(\boldsymbol{k})$], так и требованию трансляционной симметрии (48,4).

Мы видим, что коллективное возбуждение, — возбуждение, передающееся по решетке от одного атома к другому, можно рассматривать как квазичастицу с квазиимпульсом $\boldsymbol{p} = \hbar \boldsymbol{k}$. Эта квазичастица получила название экситона. К экситону

относится все сказанное в § 47 о свойствах квазичастиц. Поскольку экситоны возникают и исчезают, их следует считать частицами, подчиняющимися статистике Бозе — Эйнштейна.

В отличие от фононов, которые представляют коллективные возбуждения колебательного состояния ядер решетки, экситоны представляют электронное возбужденное состояние. Однако с перемещением экситона по кристаллу не связано движение электрического заряда. В этом отличие экситона от заряженной квазичастицы — электрона или дырки в металле или полупроводнике. Энергетический спектр экситона $\varepsilon(\boldsymbol{k})$ может быть найден в двух предельных случаях.

Первый из них — так называемый экситон малого радиуса или экситон Френкеля. Экситону малого радиуса отвечает такое возбужденное состояние кристалла, которое в изолированном атоме отвечало бы обычному возбуждению. Это означает, что возбужденный электрон в основном локализован возле некоторого атома решетки. Благодаря взаимодействию между атомами возбуждение передается соседним атомам и так мигрирует по кристаллу. Наглядно экситон Френкеля можно представить себе как пару электрон-ионный остаток, радиус которой мал по сравнению с постоянной решетки $a$.

Волновая функция $\varphi_j$ экситона малого радиуса определяется решением уравнения Шредингера с потенциалом кулоновского вазимодействия

$$u = -\frac{e^2}{r} \tag{66,3}$$

между электроном и ионным остатком.

Энергетический спектр экситона малого радиуса может быть найден в приближении взаимодействия с ближайшими соседями.

Соответствующие вычисления не отличаются от вычислений § 49 и приводят к выражению для $\varepsilon(\boldsymbol{k})$, в принципе совпадающему с (49,13) [напомним, что конкретный вид формулы (49,13) относится к электрону в $s$-состоянии; это допущение часто неоправдано для возбужденных состояний]. Спектр экситонов имеет характер полосы, причем у краев полосы энергия связана с импульсом соотношением

$$\varepsilon_n(\boldsymbol{k}) \sim \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}, \tag{66,4}$$

где $m^*$ выражается через обменный интеграл взаимодействия между атомами; $n$ — номер зоны. По порядку величины эффективная масса экситона $m^*$ близка к аналогичной величине сильно связанных электронов.

Другим предельным случаем является экситон большого радиуса или экситон Ванье. Образованию экситона большого радиуса отвечала бы ионизация изолированного атома. Это значит,

что энергия возбуждения достаточно велика, чтобы перевести электрон из заполненной в вакантную зону кристалла. Такой переход сопровождается одновременным появлением дырки в заполненной зоне. Электрон и дырки взаимодействуют между собой по закону Кулона в среде

$$U = -\frac{e^2}{\varepsilon_\infty |\boldsymbol{r}_e - \boldsymbol{r}_p|}, \tag{66,5}$$

где $\varepsilon_\infty$ — диэлектрическая проницаемость среды. Несколько ниже мы уточним, что именно следует понимать под $\varepsilon_\infty$.

Формула (66,5) с макроскопической константой $\varepsilon_\infty$ означает, что взаимодействие электрона и дырки описывается усредненным полем достаточно большого числа атомов и, следовательно, что расстояние между компонентами пары достаточно велико по сравнению с постоянной решетки.

Взаимодействующую пару электрон — дырка в кристалле и называют экситоном большого радиуса. Уравнение Шредингера для экситона, т. е. двухчастичной системы, можно представить в виде (14,5) ч. V.

Вводя радиус-вектор центра массы относительного движения, можно написать решение его в виде [ср. (14,14) ч. V]

$$\Psi = \psi\varphi,$$

где $\varphi$ удовлетворяет уравнению Шредингера для относительного движения

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta_r - \frac{e^2}{\varepsilon_\infty r}\right)\varphi = \varepsilon\varphi, \tag{66,6}$$

а $\psi$ — уравнению движения центра массы в кристалле

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2M}\Delta_R + U\right)\psi = (E + \varepsilon)\psi. \tag{66,7}$$

Уравнение (66,6) совпадает с уравнением Шредингера в атоме водорода, в котором $Z = \frac{1}{\varepsilon_\infty}$. Его решение имеет вид водородных функций $\varphi$ с энергиями $\varepsilon_n$, которые в области дискретной части спектра даются формулой (38,17) ч. V:

$$\varepsilon_n = -\frac{\mu e^2}{2\hbar^2\varepsilon_\infty^2 n^2}. \tag{66,8}$$

Решением уравнения Шредингера для движения центра массы служат функции (66,2).

Полная энергия экситона образует полосу. У края полосы ее можно написать в виде

$$E_{n,k} = \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu} - \frac{\mu e^2}{2\hbar^2\varepsilon_\infty n^2}. \tag{66,9}$$

Таким образом, экситон большого радиуса движется по кристаллу как целое и вместе с тем имеет внутреннюю степень свободы.

Замечательной особенностью экситона большого радиуса является именно наличие в его энергетическом спектре водородоподобного слагаемого, отвечающего внутренней степени свободы. В спектре поглощения света в диэлектрике должны проявляться дискретные уровни, соответствующие водородному спектру. Этот эффект наблюдался у целого ряда кристаллов и может считаться самым непосредственным доказательством существования экситонов большого радиуса. Размер большого экситона $r_W$ определяется величиной боровского радиуса при $Z=\frac{1}{\varepsilon_\infty}$, т. е. дается формулой

$$r_W=\frac{\hbar^2\varepsilon_\infty}{\mu e^2}.$$

Для того чтобы понятие экситона большого радиуса имело смысл, необходимо выполнение неравенства

$$\frac{\hbar^2\varepsilon_\infty}{\mu e^2}>a. \qquad (66,10)$$

Заметим, что наряду с состоянием дискретного спектра уравнение (66,6) имеет решения непрерывного спектра. Эти состояния отвечают распаду экситона на электрон и дырку, движущиеся по кристаллу независимо друг от друга. В отличие от движения экситона, при этом возникает не только перенос энергии, но и перенос заряда (фотопроводимость диэлектрика, если возбуждение создается его освещением).

Из сказанного выше ясно, что различие между экситоном большого и малого радиусов имеет несколько условный характер. Возможны промежуточные случаи, когда размер экситона сравним с постоянной решетки.

Мы можем обсудить теперь, какое значение диэлектрической проницаемости среды следует ввести в формулу (66,5). Электрон и дырка обращаются вокруг общего центра тяжести со скоростью, весьма большой по сравнению со скоростью движения тяжелых ядер. Вместе с тем их скорость сравнима со скоростями валентных электронов. Поэтому валентные электроны успевают поляризоваться и их поляризация следует за движением компоненты пары, тогда как ядра остаются неподвижными. Ситуация эта отвечает действию на кристалле высокочастотного электромагнитного поля. Поэтому под $\varepsilon_\infty$ следует понимать $n^2$-диэлектрическую проницаемость при высоких частотах.

В заключение заметим, что понятие экситона теряет смысл в металлах. В металлах время существования экситонов $\Delta t$ ока-

зывается столь малым, что теряет смысл понятие квазичастицы:

$$\Delta\varepsilon \sim \frac{\hbar}{\Delta t} \sim \varepsilon_n.$$

Исключение могут составить лишь сверхпроводники, обладающие щелью в энергетическом спектре.

## § 67. Внешний фотоэффект с поверхности металла

При освещении металла светом достаточно высокой частоты с его поверхности вылетают фотоэлектроны. Это явление, получившее название внешнего фотоэффекта, широко изучено и нашло общеизвестные практические приложения. Однако достаточно полная и последовательная теория внешнего фотоэффекта была развита совсем недавно[1]).

Теория внешнего фотоэффекта с поверхности металла может служить иллюстрацией подхода к изучению так называемых пороговых явлений в квантовой механике. Под пороговыми явлениями понимают переходы при энергиях, близких к энергетическому порогу данного процесса.

Рассмотрим металл, граничащий с некоторой оптически прозрачной средой. Такой средой может быть твердый диэлектрик, раствор или вакуум. При освещении поверхности металла светом с частотой $\omega$ однофотонный переход с вылетом электрона из металла может иметь место только при $\omega > \omega_0$, где пороговая частота $\omega_0$ связана с работой выхода $W$ очевидным соотношением $W = \hbar\omega_0$.

Мы ограничимся частотами $\omega$, близкими к $\omega_0$, и будем искать вероятность вылета фотоэлектронов и фототок $I$ в зависимости от частоты света.

Фотоэффект в металлах может иметь в принципе два разных механизма:

1. Поверхностный фотоэффект, при котором фотоны сталкиваются с электронами, находящимися в поверхностном слое металла. Под поверхностным слоем понимают область, в которой потенциальная энергия изменяется от значения $W$ в глубине металла до нуля на самой поверхности. В поверхностном слое электрон находится в поле сил, изменяющихся от точки к точке. Это обеспечивает выполнение законов сохранения энергии и импульса при столкновении электрона с фотоном с вылетом электрона из металла.

2. Объемный фотоэффект, наступающий в области оптической прозрачности металлов. Эта область лежит обычно

[1]) Изложение этого параграфа основано на работе А. М. Бродского, Ю. Я. Гуревича и В. Г. Левича. Phys. Solid Stat. **40**, 139 (1970), А. М. Бродский, Ю. Я. Гуревич ЖЭТФ **27**, 122 (1968).

в ультрафиолетовой части спектра. При объемном фотоэффекте взаимодействие фотонов с электронами происходит в глубине металла (в области постоянства средней потенциальной энергии). Роль третьего тела, обеспечивающего выполнение законов сохранения, играют в этом случае фотоны или примеси.

При энергиях фотонов ниже 8—10 *эв* металлы оптически не прозрачны и может иметь место только поверхностный фотоэффект (исключение составляют щелочные металлы). При $\omega \gtrsim \omega_0$ энергия вылетевших фотоэлектронов $E$ мала по сравнению с $\hbar\omega_0$, так что фотоэлектроны можно считать медленными частицами. Заметим, что обычно энергия фотоэлектронов составляет около 1 *эв*, так что она еще велика по сравнению с $kT$.

Будем считать, что металл занимает полупространство $-\infty < z \leqslant 0$ и имеет однородную внешнюю поверхность. Электрон движется в потенциальном поле с потенциальной энергией $U(z)$, которая при достаточно больших значениях $(-z)$ переходит в строго периодическое поле внутри кристалла. Среднее значение потенциальной энергии в глубине металла равно $U(z) \simeq -W$. В области $0 < z < \delta$, т. е. в поверхностном слое среды электрон попадает в сложное неизвестное потенциальное поле. Мы будем считать ширину слоя $\delta$ малой, так, чтобы имело место неравенство

$$\frac{p\delta}{\hbar} \ll 1, \qquad (67,1)$$

где $p$ — импульс вылетевшего электрона в направлении оси $z$. Иными словами, мы будем считать длину волны электрона $\lambda \gg \delta$.

Наконец, при $z > \delta$ потенциальную энергию в среде можно записать как

$$U^a(z) = -V_0 - \frac{e^2}{4\varepsilon_{эфф} z}. \qquad (67,2)$$

Первое слагаемое имеет смысл потенциальной энергии электрона в среде (в вакууме мы принимаем его энергию равной нулю). Второе слагаемое представляет силу изображения в среде с эффективной диэлектрической проницаемостью $\varepsilon_{эфф}$. Поскольку электрон движется в среде с энергией значительно большей, чем тепловая, $\varepsilon_{эфф}$ не совпадает со статистической диэлектрической проницаемостью, а скорее приближается к оптической проницаемости.

Напишем уравнение Шредингера для волновой функции электрона внутри и вне металла. Поскольку металл считается однородным в плоскости $xy$, невозмущенную волновую функцию можно представить в виде

$$\psi = \psi_0(E, p, z)\, e^{ip_{\parallel}\rho}, \qquad (67,3)$$

где $\boldsymbol{p}_\parallel$ и $\boldsymbol{\rho}$ — импульс и радиус-вектор в плоскости $xy$ и $E$ — энергия электрона.

Невозмущенное уравнение Шредингера имеет вид

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial z^2}+\frac{p_\parallel^2}{2m}+U(z)\right\}\psi_0=E\psi_0. \qquad (67,4)$$

При воздействии поля излучения, которое можно характеризовать оператором $\hat{H}'(z)\,e^{i\omega t}$, в первом приближении теории возмущений можно написать

$$\psi \cong \psi_0(z)+\psi_1(z), \qquad (67,5)$$

где $\psi_1$ удовлетворяет уравнению

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial z^2}+U(z)+\frac{p_\parallel^2}{2m}-(E+\hbar\omega)\right\}\psi_1=-\hat{H}'\psi_0(z). \qquad (67,6)$$

Здесь $(E+\hbar\omega)$ — энергия электрона, поглотившего фотон.

Воспользовавшись законом сохранения энергии

$$E+\hbar\omega=\frac{p^2+p_\parallel^2}{2m}-V_0, \qquad (67,7)$$

перепишем (67,6) в виде

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial z^2}+\frac{p^2}{2m}+U(z)+V_0\right\}\psi_1=-\hat{H}'\psi_0. \qquad (67,8)$$

Рассмотрим решение уравнения (67,8) в областях $z>\delta$ и $z<0$. В первой области, учитывая быстрое спадание $\psi_0$ вне металла, можно опустить член $H'\psi_0$ в правой части (67,8).

Вне металла электрон можно считать движущимся в поле $U^a(z)$. При этом импульс в плоскости $(xy)$ сохраняется, так что

$$p_\parallel^{\text{внутр}}=p_\parallel^{(a)}. \qquad (67,9)$$

Это позволяет представить (67,8) в виде

$$\left(\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial z^2}+\frac{p^2}{2m}+\frac{e^2}{4\varepsilon_{\text{эфф}}z}\right)\psi_1(z)=0. \qquad (67,10)$$

Уравнение (67,10) совпадает с уравнением, описывающим движение электрона с нулевым орбитальным моментом в кулоновском поле. Нужное нам асимптотическое выражение $\psi_1$ при $z\to\infty$ в кулоновском поле, отвечающее уходящей на бесконечность частице, имеет вид

$$\psi_1(z\to\infty)\equiv\chi^+_{z\to\infty}=\exp\{i(pz+\eta\ln 2pz+\delta_0)\}, \qquad (67,11)$$

где обозначено

$$\eta = \frac{me^2}{\varepsilon_{\text{эфф}} p}, \qquad (67{,}12)$$

$$\delta_0 = \arg(1 - i\eta). \qquad (67{,}13)$$

При $z \to 0$ для $\psi_1$ можно воспользоваться рассуждениями § 38 ч. V, положив

$$\psi_1 \equiv \chi^+_{z\to 0} \sim \left[\frac{1-e^{-2\pi\eta}}{2\pi\eta}\right]^{1/2} \left(\frac{pz}{\hbar}\right). \qquad (67{,}14)$$

Поэтому $\psi_1(z)$ можно представить в виде

$$\psi_1(z) = G(p, \omega)\,\chi\left(\frac{pz}{\hbar}, \eta\right), \qquad (67{,}15)$$

где $\chi$ — кулоновская функция с указанным асимптотическим поведением, а $G(p, \omega)$ — функция, не зависящая от $z$. Для ее определения (67,15) следует сомкнуть с решением внутри металла, т. е. с решением (67,8) при $z < \delta$.

Подобно тому как это было сделано в § 93 ч. V, при этом смыкании следует воспользоваться условием $\left(\frac{\psi'}{\psi} = \text{const}\right)$. Вместо того, чтобы производить смыкание при $z = \delta$, мы будем смыкать (67,15) с решением внутри металла при $z = 0$. На длине $\delta$ волновая функция частицы с длиной волны $\lambda \gg \delta$ не успевает существенным образом измениться. Обращаясь к области $z < 0$, заметим, что внутри металла потенциальная энергия $|U(z) + V_0|$ весьма велика по сравнению с величиной $\frac{p^2}{2m}$. Поэтому в (67,8) при $z < 0$ в уравнении Шредингера можно опустить слагаемое $\frac{p^2}{2m}$. В результате волновая функция внутри металла оказывается не зависящей от величины $p$.

В точке $z = 0$ следует написать условие смыкания функции (67,15), зависящей, вообще говоря, от $p$ с функцией, от $p$ не зависящей. Ясно, что условие смыкания может быть выполнено при всех значениях $p$, если при $z \to 0$ $\psi_1(z)$, даваемое (67,15), также не зависит от $p$.

Поэтому следует положить

$$G(p, \omega) = \left[\frac{2\pi\eta}{1-e^{-2\pi\eta}}\right]^{1/2} f(\omega), \qquad (67{,}15')$$

где $f(\omega)$ — некоторая функция частоты, не зависящая от $p$.

Таким образом, при $z \to \infty$ получаем

$$\psi_1 \to \left[\frac{2\pi\eta}{1-e^{-2\pi\eta}}\right]^{1/2} e^{\frac{ipz}{\hbar}}. \qquad (67{,}16)$$

Зная волновую функцию, можно найти фототок. Именно, плотность потока вероятности

$$j = \frac{\hbar}{2m}(\psi^*\nabla\psi - \psi\nabla\psi^*) = \frac{\sqrt{2E_0}}{m}\frac{1}{1 - e^{-\sqrt{E_0/E}}}, \tag{67,17}$$

где $E_0 = \frac{33}{\varepsilon^2_{эфф}} eV$.

Полный фототок с единицы поверхности металла дается формулой

$$J = e\int jn(E)\rho(E, p_\parallel)\theta(E)\,dE\,dp_\parallel =$$

$$= e\sqrt{\frac{2E_0}{m^2}}f(\omega)\int\limits_W^\infty \frac{dE}{\left(\exp\left(\frac{E-\mu}{kT}\right)+1\right)}\frac{1}{\left(1 - \exp\left\{-\sqrt{\frac{E_0}{E}}\right\}\right)} \times$$

$$\times \int\limits_0^{\sqrt{2m(E+\hbar\omega+V_0)}} 2\pi\rho(E, p_\parallel)\,|p_\parallel|\,dp_\parallel, \tag{67,18}$$

где $n(E)$ — распределение Ферми, $\rho(E, p_\parallel)$ — число состояний с данным $E$ и $p_\parallel$. Химический потенциал $\mu$ связан с работой выхода и потенциалом $V_0$ очевидным соотношением $\mu = -W + V_0$. Считая $\rho(E, p_\parallel)$ медленно изменяющейся функцией, можно вынести ее за знак интеграла. Дальнейшие выкладки можно провести для двух случаев — вылета электронов в вакуум и среду.

В первом случае энергия фотоэлектронов $E \ll E_0$ и $j = \mathrm{const}$. При этом вычисление интеграла (67,18) дает

$$I \sim (E - \hbar\omega_0)^2. \tag{67,19}$$

Полученный закон зависимости фототока от частоты (закон Фаулера) хорошо согласуется с опытом.

При вылете в диэлектрик или раствор электролита $\varepsilon_{эфф} \sim 6 - 10$, так что $E_0 \sim 0{,}3 - 1$ *эв* и $E > E_0$. Соответственно, $j \sim \sqrt{E}$.

В этом случае

$$I \sim (E - \hbar\omega_0)^{5/2}. \tag{67,20}$$

Эта частотная зависимость также была хорошо подтверждена опытными данными для фототока на границе металл — раствор.

ГЛАВА VII

# ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ИЗЛУЧЕНИЯ С ГАЗОМ СВОБОДНЫХ ЭЛЕКТРОНОВ

## § 68. Разреженная плазма в поле низкочастотного излучения

В последние годы были обнаружены многочисленные и важные астрономические объекты, являющиеся источниками весьма мощного излучения. Оказалось, что эти объекты обладают характерным спектром излучения, очень сильно отличающимся от равновесного (планковского) распределения, с максимумом интенсивности, лежащим в области радио- или инфракрасных волн. Эти объекты оказались окруженными облаками (атмосферами) весьма разреженной и полностью ионизованной плазмы. Наряду с такими внеземными мощными источниками низкочастотного излучения, в земных условиях также удалось создать подобного рода излучающие системы. Ими являются лазеры и современные СВЧ-излучатели, у которых высокоинтенсивное излучение создается в оптическом или радиодиапазоне.

В связи с этим в физике возник большой интерес к поведению разреженной плазмы в поле излучения высокой интенсивности. При этом выяснилось, что такая, казалось бы, простая, система как свободные электроны, находящиеся в поле излучения, изучена далеко не так полно, как это представлялось ранее. С другой стороны, именно кинетический подход к этой системе позволил исследовать ее свойства с достаточной полнотой. Поэтому мы подробно осветим вопрос о поведении газа свободных электронов в поле излучения [1]).

Рассмотрим весьма разреженную плазму, помещенную в поле интенсивного низкочастотного излучения. С самого начала мы ограничимся областью нерелятивистских энергий электронов и нерелятивистских частот.

Очевидно, что взаимодействие излучения с тяжелыми ядрами играет подчиненную роль по сравнению с прямым взаимо-

---

[1]) В этой главе мы следуем работам: Я. Б. Зельдович, Е. В. Левич, ЖЭТФ **55**, 2423 (1968); Е. В. Левич, ЖЭТФ **60**, 112 (1971); Т. Peraud, Le Journal de Physique **29**, 88, 306, 872 (1958); А. С. Компанеец, ЖЭТФ **31**, 876 (1956); Я. Б. Зельдович, Е. В. Левич, Письма ЖЭТФ **11**, 57 (1970).

действием с электронами. Естественно, что условие электронейтральности плазмы не может быть нарушено: всякое изменение распределения электронной плотности вызывает соответствующие смещения ядер. Если, однако, движение электронов вызвано полем излучения с частотой, большой по сравнению с ленгмюровской частотой плазмы, то коллективное движение ядер и электронов оказывается несущественным[1]). При движении в таком поле электроны приобретают до известной степени независимость от ядер и взаимодействуют с излучением как свободные частицы. Поэтому для наших целей достаточно рассмотреть идеализированную систему — разреженный газ электронов в поле излучения. Более тонкие эффекты, связанные с коллективными движениями в плазме, рассматриваться не будут.

Возможен двоякий подход к рассмотрению поведения свободных электронов в поле низкочастотного излучения: 1) во-первых, можно провести классический расчет движения отдельных электронов в волновом поле и затем перейти к рассмотрению статистического поведения газа таких электронов; 2) можно с самого начала рассмотреть поведение системы — газ свободных электронов + газ фотонов. Свойства такой системы в классической области получаются при $\hbar \to 0$.

Классическое рассмотрение возможно и законно в области достаточно низких частот и высоких плотностей излучения. При этом числа заполнения (см. § 101 ч. V) фотонов $n(\boldsymbol{k})$ достаточно велики и в квантовомеханических формулах можно перейти к классическому пределу, как это всегда можно сделать при больших квантовых числах.

Подчеркнем прежде всего, что движение электрона в спектральном поле излучения, содержащем непрерывный ряд частот и волновых векторов, существенно отличается от его движения в поле отдельной монохроматической волны. Поясним это на простейшем примере движения электрона в поле двух волн с одинаковыми частотами, но сдвинутыми по фазе. Уравнение движения нерелятивистского электрона запишем в виде

$$m\frac{d\boldsymbol{v}}{dt} = e\left\{\boldsymbol{E}_1 + \boldsymbol{E}_2 + \frac{1}{c}[\boldsymbol{v}, \boldsymbol{H}_1 + \boldsymbol{H}_2]\right\}. \tag{68,1}$$

Будем искать решение уравнения (68,1) по методу последовательных приближений, т. е. полагая

$$\boldsymbol{v} = \boldsymbol{v}_0 + \boldsymbol{v}_1, \quad |\boldsymbol{v}_1| \ll |\boldsymbol{v}_0|,$$

$$m\frac{d\boldsymbol{v}_0}{dt} \cong e(\boldsymbol{E}_1 + \boldsymbol{E}_2), \quad m\frac{d\boldsymbol{v}_1}{dt} \simeq \frac{e}{c}[\boldsymbol{v}_0, \boldsymbol{H}_1 + \boldsymbol{H}_2]. \tag{68,2}$$

---

[1]) Более точные расчеты показывают, что частоты поля излучения $\omega$ должны быть больше, чем $\omega_0 c/u$, где $u$ — тепловая скорость электронов.

Если представить поля в виде

$$\boldsymbol{E}_1 = \boldsymbol{E}_0 e^{i\omega t} + \text{сопряженное}, \tag{68,3}$$

$$\boldsymbol{E}_2 = \boldsymbol{E}_0 e^{i\omega t + i\alpha} + \text{сопряженное}, \tag{68,4}$$

$$\boldsymbol{H}_1 = [\boldsymbol{E}_1 \boldsymbol{n}_1], \tag{68,5}$$

$$\boldsymbol{H}_2 = [\boldsymbol{E}_2 \boldsymbol{n}_2], \tag{68,6}$$

то без труда найдем

$$\boldsymbol{v}_0 = \frac{e(\boldsymbol{E}_1 + \boldsymbol{E}_2)}{i\omega m}. \tag{68,7}$$

При этом для $\boldsymbol{v}_1$ находим

$$\frac{d\boldsymbol{v}_1}{dt} = \frac{e^2}{i\omega c m^2}\{[\boldsymbol{E}_1 \boldsymbol{H}_2] + [\boldsymbol{E}_2 \boldsymbol{H}_1]\} =$$

$$= \frac{e^2}{i\omega c m^2}\{[\boldsymbol{E}_0, [\boldsymbol{E}_0 \boldsymbol{n}_2]](e^{2i\omega t + i\alpha} + e^{i\alpha} + \text{сопряженное})\}. \tag{68,8}$$

Мы видим, что если сдвиг фазы $\alpha$ отличен от нуля, то на электрон действует постоянная (систематическая) сила $\sim \frac{e^2 E_0^2}{\omega c m^2}$. В отличие от периодического движения электрона в поле одной волны, в поле двух волн электрон, помимо колебаний, должен под действием этой силы совершать систематическое движение, т. е. производить систематический набор энергии. Только в случае двух волн одного направления, когда полное магнитное поле $(\boldsymbol{H}_1 + \boldsymbol{H}_2)$ сдвинуто по отношению к полному электрическому полю $(\boldsymbol{E}_1 + \boldsymbol{E}_2)$ на фазу $\pi/2$, электрон будет совершать строго периодическое движение. Подчеркнем, что электрон взаимодействует одновременно с двумя волнами и поэтому систематическая сила оказывается пропорциональной произведению напряженностей полей.

Если обратиться теперь к реальному спектральному полю, содержащему бесконечное множество гармоник $\omega_i$, то ясно, что задача о движении электрона в поле приобретает статистический характер. Реальный смысл имеют только величины, усредненные по всем значениям случайных фаз. Таким образом, уже задача о движении одного электрона в реальном поле требует статистического подхода. Ввиду сложности классического метода расчета, требующего наложения полей и последующего усреднения по случайным фазам [заметим, что уже формула (68,8) достаточно громоздка], естественно возникает мысль о втором из указанных выше подходов к решению задачи. Как будет видно из дальнейшего, он действительно оказывается неизмеримо более ясным с принципиальной стороны и простым в вычислительном отношении.

В системе, состоящей из свободных электронов и фотонов, имеют место два основных процесса взаимодействия между ними: 1) комптоновское рассеяние, 2) свободно-свободные переходы (тормозное излучение или поглощение фотонов при столкновениях между электронами).

Кроме того, в системе (газ электронов + газ фотонов) происходят столкновения между электронами без излучения.

В реальной плазме к этим процессам прибавляются столкновения электронов с ядрами и свободно-свободные переходы при этих столкновениях, которые являются более существенными, чем при столкновениях электронов.

При комптоновском рассеянии фотона на свободном электроне происходит изменение как волнового вектора, так и частоты фотона. Проще всего рассмотреть изменение этих величин в системе отсчета $K_0$, в которой электрон покоится. В этой системе отсчета можно написать

$$\Delta \boldsymbol{p}_0 = \frac{\hbar\omega_0}{c}(\boldsymbol{l} - \boldsymbol{l}') + \frac{\hbar}{c}(\omega_0 - \omega_0')\boldsymbol{l}' = \Delta\boldsymbol{p}_1 + \Delta\boldsymbol{p}_2, \tag{68,9}$$

где

$$\Delta \boldsymbol{p}_1 = \frac{\hbar\omega_0}{c}(\boldsymbol{l} - \boldsymbol{l}'); \tag{68,10}$$

$\omega_0$ и $\omega_0'$ — частоты, $\boldsymbol{l}$ и $\boldsymbol{l}'$ — единичные векторы в направлении распространения падающего и рассеянного фотонов. Величина $\Delta\boldsymbol{p}_1$ представляет изменение импульса электрона в результате рассеяния без изменения частоты фотона, т. е. в результате простого изменения направления его полета.

Величина $\Delta\boldsymbol{p}_2$ определяет изменение импульса электрона в результате передачи ему энергии от фотона в акте неупругого рассеяния. Пользуясь выражением для изменения частоты при комптон-эффекте [см. (17,12) ч. I], можно написать:

$$\omega_0 - \omega_0' = \Delta\omega_0 = \frac{\hbar\omega_0^2}{mc^2}(1 - \boldsymbol{l}\boldsymbol{l}'), \tag{68,11}$$

откуда следует, что

$$\Delta\boldsymbol{p}_2 = \frac{\hbar^2\omega_0^2}{mc^3}\boldsymbol{l}'(1 - \boldsymbol{l}\boldsymbol{l}'). \tag{68,12}$$

Очевидно, что отношение

$$\frac{|\Delta\boldsymbol{p}_2|}{|\Delta\boldsymbol{p}_1|} \sim \frac{\hbar\omega_0}{mc^2} \ll 1$$

в нерелятивистском приближении весьма мало́.

Заметим еще, что в лабораторной системе отсчета изменение частоты при рассеянии на электроне с импульсом $\boldsymbol{p}$ имеет вид

$$\Delta\omega \cong \Delta\omega_0 + \omega_0\left(1 + \frac{\boldsymbol{pl}}{mc}\right) - \omega_0\left(1 + \frac{\boldsymbol{pl'}}{mc}\right) \cong$$
$$\cong \Delta\omega_0 + \frac{\omega_0}{mc}(\boldsymbol{p}, \boldsymbol{l} - \boldsymbol{l'}) \approx \frac{\hbar\omega^2}{mc^2}(1 - \boldsymbol{ll'}) + \frac{\omega}{mc}(\boldsymbol{p}, \boldsymbol{l} - \boldsymbol{l'}) \quad (68{,}13)$$

в том же приближении нерелятивистских скоростей.

Что же касается вероятности комптоновского рассеяния фотона с изменением волнового вектора $\boldsymbol{k} \to \boldsymbol{k'}$ в телесном угле $d\Omega$, то ее можно представить в виде

$$dw_{\boldsymbol{k}\to\boldsymbol{k'}} = cN_e[1 + n(\boldsymbol{k'})]\, n(\boldsymbol{k})\, d\sigma, \quad (68{,}14)$$

где $n(\boldsymbol{k})$ — число фотонов с волновым вектором $\boldsymbol{k}$ и $N_e$ — число электронов в единице объема. Множитель $[1 + n(\boldsymbol{k})]$ (сравнить с (103,7)) связан с бозе-статистикой фотонов. Эффективное сечение $d\sigma$ дается в интересующем нас приближении длинных волн формулой Томсона. В системе покоящегося электрона $K_0$ (см. § 36 ч. I):

$$d\sigma = \sigma\, d\Omega = \left(\frac{e^2}{mc^2}\right)^2 \frac{1 + \cos^2\alpha}{2}\, d\Omega, \quad (68{,}15)$$

где $\alpha$ — угол рассеяния.

Мы видим, что можно различать два вида рассеяния — спонтанное, пропорциональное числу фотонов $n(\boldsymbol{k})$, и индуцированное, пропорциональное $n(\boldsymbol{k})\,n(\boldsymbol{k'})$. В классическом пределе больших чисел заполнения вероятность индуцированного рассеяния гораздо больше вероятности спонтанного рассеяния. Это — общее соотношение между спонтанными и вынужденными процессами. Последние всегда отвечают классическому поведению системы. Поэтому усредненное движение электрона в спектральном поле излучения в классическом пределе, обсуждавшееся нами выше, может быть найдено из рассмотрения эффекта индуцированного рассеяния фотонов этим электроном.

Имея в виду переход к классическому пределу $\hbar \to 0$, введем вместо числа фотонов с данным значением вектора $\boldsymbol{k}$ спектральное распределение $\rho(\omega, \boldsymbol{l})$. Согласно (76,9) ч. III спектральное распределение выражается через число фотонов по формуле

$$\rho(\omega, \boldsymbol{l}) = \frac{\hbar\omega^3}{\pi^2 c^3}\, n(\omega, \boldsymbol{l}). \quad (68{,}16)$$

Спектральное распределение определяет среднюю энергию излучения с данной частотой. Очевидно, что $\rho(\omega, \boldsymbol{l})$ не зависит от значения постоянной Планка $\hbar$.

Мы видим, что в классическом пределе

$$dw \simeq cN_e \frac{\pi^4 c^6}{\hbar^2\omega^6}\, \rho(\omega, \boldsymbol{l})\, \rho(\omega, \boldsymbol{l'})\, d\sigma. \quad (68{,}17)$$

Подчеркнем, что в процессе рассеяния число фотонов остается неизменным.

Тормозные свободно-свободные переходы представляют излучение или поглощение фотонов электроном, движущимся в поле ядра или другого электрона. Вероятность тормозного процесса $W_{ff}$ пропорциональна квадрату плотности электронов $N_e$ и имеет вид [1])

$$W_{ff} \sim \frac{N_e^2}{\omega^3}. \tag{68,18}$$

Вероятность тормозных процессов при малой плотности электронного газа и больших значениях плотности излучения оказывается, вообще говоря, гораздо меньшей вероятности комптоновского рассеяния. Поэтому мы будем пренебрегать тормозными процессами. Исключение составляет область очень низких частот. Поскольку $W_{ff}$ очень быстро растет с уменьшением частоты, при достаточно низких частотах тормозные процессы становятся преобладающими. Это накладывает второе ограничение на значение рассматриваемой нами области частот, т. е.

$$\omega > \omega_{\text{гр}}, \tag{68,19}$$

где $\omega_{\text{гр}}$ — та частота, при которой (при данной плотности электронного и фотонного газов) изменение функции распределения из-за тормозного поглощения испускания становится больше, чем из-за комптон-эффекта. Частота $\omega_{\text{гр}}$, очевидно, тем ниже, чем меньше плотность $N_e$ и больше $\rho(\omega, t)$.

До сих пор мы предполагали, что разреженная плазма взаимодействует с излучением с известным спектральным распределением $\rho(\omega, t)$. Возможна, однако, и другая постановка вопроса. Именно, в результате взаимодействия с электронами изменяется спектральное распределение излучения. Например, при взаимодействии с электронным газом, находящимся в состоянии равновесия, спектральное распределение излучения изменяется (эволюционирует) во времени. В тех же приближениях этот процесс также будет рассмотрен в дальнейшем.

## § 69. Кинетические уравнения для электронов и фотонов

Обратимся прежде всего к формулировке кинетических уравнений для электронов и фотонов. В кинетическом уравнении

$$\frac{df}{dt} = J, \tag{69,1}$$

---

[1]) См., например, В. Гайтлер, Квантовая теория излучения, ИЛ, 1956, стр. 279.

где $f = f(\boldsymbol{p}, t)$ — функция распределения электронов, интеграл столкновений можно представить в виде

$$J = J_c + I_{ee}. \tag{69,2}$$

Здесь $I_{ee}$ — интеграл столкновения электронов между собой, определенный формулой Ландау (34,7).

Интеграл $J_c$ определяет изменение функции распределения электронов вследствие комптоновского рассеяния ими падающих фотонов.

При каждом акте рассеяния происходит изменение импульса электрона согласно формуле (68,9).

Мы будем считать систему электронов и фотонов однородной в пространстве, так что функция распределения $f$ не зависит от координат.

В дальнейшем мы будем рассматривать самый общий случай анизотропного распределения электронов и фотонов в пространстве импульсов. Поэтому мы будем считать функцию распределения электронов $f(\boldsymbol{p}, t)$ зависящей от вектора импульса и времени; соответственно функцию распределения фотонов (числа заполнения) представим в виде $n = n(\boldsymbol{k}, t)$. С учетом сказанного, а также формулы (68,14) для вероятности рассеяния, интеграл столкновений электронов с фотонами можно $J_c$ записать в виде

$$J_c = -\int dW_{\boldsymbol{k}\to\boldsymbol{k}'} f(\boldsymbol{p}, t) + \int dW_{\boldsymbol{k}'\to\boldsymbol{k}} f(\boldsymbol{p}', t), \tag{69,3}$$

где

$$dW_{\boldsymbol{k}'\to\boldsymbol{k}} = c\,[1 + n(\boldsymbol{k}, t)]\, n(\boldsymbol{k}', t)\, d\sigma\, d\boldsymbol{k}' = \frac{dw_{\boldsymbol{k}'\to\boldsymbol{k}}}{N_e}.$$

Первый интеграл в (69,3) выражает убыль числа электронов с импульсом $\boldsymbol{p}$, второй — приход электронов в это состояние в результате столкновений с фотонами.

В рассматриваемом нами случае низких частот излучения изменение импульса электрона при одиночном соударении с фотоном мало́ по сравнению с его средним значением. Поэтому функция распределения является медленно изменяющейся функцией своего аргумента, и в соответствии со сказанным в § 10 кинетическое уравнение сводится к уравнению типа Фоккера — Планка.

Не повторяя выкладок § 10, можно сразу написать уравнение Фоккера — Планка для трехмерного пространства импульсов, т. е. при $\lambda = p_x, p_y, p_z$, в виде

$$\frac{df}{dt} = -\frac{\partial}{\partial p_i}\left\{a_i f - \frac{\partial}{\partial p_k}(D_{ik} f)\right\} + I_{ee} \qquad (i,\ k = x,\ y,\ z), \tag{69,4}$$

где коэффициенты диффузии $D_{ik}$ и подвижность $a_i$ в пространстве импульсов выражаются формулами

$$D_{ik} = \int \Delta p_i \Delta p_k \, dW_{k \to k'}, \tag{69,5}$$

$$a_i = \int \Delta p_i \, dW_{k \to k'}. \tag{69,6}$$

Подставляя $dW_{k \to k'}$ из формулы (69,3), находим:

$$D_{ik} = \langle \Delta p_i \Delta p_k \rangle = \int \Delta p_i \Delta p_k n(\boldsymbol{k}) [1 + n(\boldsymbol{k}')] \, c \, d\boldsymbol{k} \, d\sigma, \tag{69,7}$$

$$a_i = \langle \Delta p_i \rangle = \int \Delta p_i n(\boldsymbol{k}) [1 + n(\boldsymbol{k}')] \, c \, d\boldsymbol{k} \, d\sigma, \tag{69,8}$$

где $\langle\,\rangle$ означает среднее по функции распределения фотонов. Заметим, что коэффициенты диффузии в пространстве импульсов характеризуют беспорядочный набор энергии электронами, тогда как подвижность — действующую на электрон систематическую силу. В следующих параграфах мы вычислим кинетические коэффициенты (69,7) и (69,8) и найдем решение уравнения (69,4) в различных условиях.

Оказывается целесообразным проводить вычисление кинетических коэффициентов в той системе отсчета, в которой электрон покоится. Именно в этой системе отсчета сечение рассеяния имеет простой вид. Кроме того, имеет простой вид и выражение для передаваемого импульса.

Прежде чем перейти к обсуждению кинетического уравнения для электронов, найдем соответствующее кинетическое уравнение для фотонов. В этом случае мы ограничимся случаем изотропного распределения фотонов, т. е. $n = n(\omega, t)$.

Имеем, очевидно,

$$\frac{dn}{dt} = J_c^{(f)}, \tag{69,9}$$

где $J_c^{(f)}$ — интеграл столкновений фотонов со свободными электронами:

$$J_c^{(f)} = -\int n(\omega, t) [1 + n(\omega', t)] \, c \, d\sigma f(\boldsymbol{p}, t) \, d\boldsymbol{p} + \\ + \int n(\omega', t) [1 + n(\omega, t)] \, c \, d\sigma f(\boldsymbol{p}', t) \, d\boldsymbol{p}. \tag{69,10}$$

Первое слагаемое дает убыль числа фотонов с частотой $\omega$ при столкновении с электроном с импульсом $\boldsymbol{p}$, второе — приход фотонов в это состояние.

В состоянии равновесия $\frac{dn}{dt} = \frac{df}{dt} = 0$. Как мы видели ранее, максвелловское распределение обращает в нуль интеграл столкновений электронов между собой $I_{ee}$. Простая проверка позво-

ляет убедиться в том, что интегралы $J_c$ и $J_c^{(f)}$ обращаются в нуль максвелловским распределением с температурой $T$ для электронов и одновременно функцией распределения фотонов вида

$$n(\mu,\ \omega)=\frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega-\mu}{kT}}-1}, \tag{69,11}$$

т. е. функцией распределения Бозе с химическим потенциалом $\mu$, отличным от нуля. Последний результат имеет простой смысл: в нашем приближении, когда излучением и поглощением фотонов пренебрегается, их полное число в системе фиксировано. Напомним [ср. (76,6) и ч. III], что в обычных условиях, когда число фотонов не фиксировано, минимуму свободной энергии отвечает значение $\mu=0$. Поэтому ясно, что процессы поглощения и излучения приведут к тому, что по прошествии достаточно большого промежутка времени $\mu\to 0$ и распределение (69,11) превратится в распределение Планка.

Переходя теперь к обсуждению кинетического уравнения для фотонов (69,9), покажем, что и оно может быть сведено к дифференциальному уравнению типа Фоккера — Планка. Для случая нерелятивистских электронов и достаточно мягкого излучения $\hbar\omega\ll mc^2$ и, как видно из (68,6), изменение частоты фотона при рассеянии мало́.

Допустим, что электроны можно характеризовать равновесным максвелловским распределением с температурой $T$. Вводя новую переменную $x=\frac{\hbar\omega}{kT}$, можно разложить функцию распределения фотонов в ряд по степеням $\Delta x=\frac{\hbar\,\Delta\omega}{kT}$.

Тогда имеем, ограничиваясь первыми членами разложения,

$$J_c^{(f)}=-\int d\boldsymbol{p}\,[1+n(x+\Delta x)]\,n(x)\,c\,d\sigma f(\varepsilon)+$$
$$+\int d\boldsymbol{p}n(x+\Delta x)\,[1+n(x)]\,c\,d\sigma f(\varepsilon)=[1+n(x)]\int d\boldsymbol{p}f(\varepsilon)\,\Delta x c\,d\sigma+$$
$$+\frac{1}{2}\left[\frac{\partial^2 n}{\partial x^2}+2(1+n)\frac{\partial n}{\partial x}+n(1+n)\right]c\int d\boldsymbol{p}\,d\sigma\,(\Delta x)^2 f(\varepsilon)=J_c^{(1)}+J_c^{(2)}. \tag{69,12}$$

Вычисление второго интеграла в разложении (69,12) проводится без труда:

$$J_c^{(2)}=\frac{1}{2}\left[\frac{\partial^2 n}{\partial x^2}+2(1+n)\frac{\partial n}{\partial x}+n(1+n)\right]cI,$$

где

$$I=c\int d\boldsymbol{p}\,d\sigma\,(\Delta x)^2 f(\varepsilon)=\sigma_{\text{T}}N_e\left(\frac{kT}{mc^2}\right)x^2. \tag{69,13}$$

При этом для $\Delta x = \frac{\hbar\,\Delta\omega}{kT}$ мы воспользовались формулой (68,13) и через $\sigma_T$ обозначили полное томсоновское сечение

$$\sigma_T = \frac{8\pi}{3}\left(\frac{e^2}{mc^2}\right)^2.$$

Вычисление первого интеграла в (69,12) гораздо более громоздко. Однако это вычисление можно заменить следующим полезным и общим рассуждением. Закон сохранения числа частиц при рассеянии — в данном случае числа фотонов, требует, чтобы кинетическое уравнение имело вид

$$\frac{\partial n}{\partial t} = J_c^{(f)} = -\operatorname{div} \boldsymbol{j}, \tag{69,14}$$

где $\boldsymbol{j}$ — поток фотонов в пространстве импульсов. В силу изотропности функции распределения фотонов дивергенция потока имеет вид

$$\operatorname{div} \boldsymbol{j} = \frac{1}{x^2}\frac{\partial}{\partial x}\{x^2 j(x)\}. \tag{69,15}$$

Кроме того, в состоянии равновесия, когда $n(x)$ представляет распределение Планка, поток фотонов $j(x)$ должен обращаться в нуль. Поэтому поток фотонов представим в виде

$$j = \left[\frac{\partial n}{\partial x} + A(x)\right] g(x),$$

где $A(x)$ и $g(x)$ — функции, подлежащие определению. В состоянии равновесия $j = 0$. Кроме того, для равновесного распределения имеет место равенство

$$(1+n)\,n = -\frac{\partial n}{\partial x}, \tag{69,16}$$

в чем легко убедиться непосредственной проверкой. Поэтому, если поток $j(x)$ представить в виде

$$j(x) = \left[\frac{\partial n}{\partial x} + n(1+n)\right] g(x), \tag{69,17}$$

то оба сформулированных выше требования к $j$ будут удовлетворены. Соответственно, находим для $J_c^{(f)}$ общее выражение:

$$J_c^{(f)} = -\frac{1}{x^2}\frac{\partial}{\partial x}\left\{x^2 g(x)\left[\frac{\partial n}{\partial x} + n(1+n)\right]\right\}. \tag{69,18}$$

Для того чтобы оба выражения для $J_c^{(f)}$ — (69,18) и (69,12), совпадали, необходимо положить $g(x) = -\frac{x^2\sigma_T N_e kT}{mc^2}$.

Таким образом, окончательно

$$\frac{\partial n(x, t)}{\partial t} = \frac{kT}{mc^2}(\sigma N_e c)\frac{1}{x^2}\frac{\partial}{\partial x}x^4\left\{\frac{\partial n(x, t)}{\partial x} + n(x, t) + [n(x, t)]^2\right\}. \qquad (69,19)$$

Заметим, что хотя по форме уравнение (69,19) сходно с уравнением Фоккера — Планка, оно все же не является обычным уравнением этого типа. Наличие множителя $(1+n)$ в вероятности перехода привело к тому, что уравнение (69,19) оказалось нелинейным по отношению к искомой функции $n(x)$.

Совокупность кинетических уравнений для электронов (69,4) и фотонов (69,19) образует, очевидно, связанную систему. Получение общего решения этой системы было бы слишком сложной задачей. Поэтому в дальнейшем мы рассмотрим два предельных случая: 1) при заданном произвольном распределении фотонов ищется распределение электронов $f(p, t)$, 2) при заданном равновесном распределении электронов ищется функция распределения фотонов $n(\omega, t)$.

## § 70. Кинетика бозе-конденсации фотонного газа

Обратимся прежде всего ко второй постановке задачи — изучению изменения свойств неравновесного излучения при взаимодействии со свободными электронами. Иными словами, найдем закон эволюции распределения фотонов во времени $n(\omega, t)$ при их взаимодействии с электронным газом. Как это уже указывалось ранее, при этом состояние электронного газа будем считать фиксированным. Именно, будем полагать, что электронный газ все время находится в равновесном состоянии и характеризуется некоторой температурой $T_e$.

Сначала мы будем полностью пренебрегать процессами свободно-свободных переходов и считать, что рассеяние является единственным видом взаимодействия фотонов с электронами. Роль поглощения будет отмечена позднее.

Кинетическое уравнение (69,19), описывающее временну́ю зависимость $n(\omega, t)$, необходимо дополнить начальным условием.

Пусть $n_{\text{п}}(\omega)$ — равновесное (планковское) распределение фотонов, отвечающее температуре $T_e$. Тогда возможны два случая:

1) в момент времени $t = 0$ в системе задана $n(\omega, 0)$ такая, что полное число фотонов

$$N \sim \int_0^\infty n(x, 0)\, x^2\, dx$$

большее, чем в равновесном излучении

$$N_\text{п} \sim \int_0^\infty n_\text{п}(x)\, x^2\, dx, \tag{70,1}$$

т. е. $N > N_\text{п}$;

2) в начальный момент времени число фотонов

$$N < N_\text{п}. \tag{70,2}$$

Ясно, что ход эволюции $n(x, t)$ в обоих случаях будет различным. В первом случае при столкновениях с электронами фотоны будут преимущественно терять энергию и эволюция их спектра будет состоять в среднем в движении вниз по энергетической оси («охлаждение» фотонного газа). Во втором случае при столкновениях фотоны будут в среднем приобретать энергию («нагревание» фотонов).

Поскольку мы не учитываем явления поглощения фотонов, их полное число в ходе эволюции будет оставаться постоянным.

Начинаем с рассмотрения явления «охлаждения» фотонного газа. При этом нас будет, как это подчеркивалось выше, интересовать область сравнительно низких частот. Здесь обмен энергией между фотоном и электроном при рассеянии мал и справедливо кинетическое уравнение в форме (69,19). Более того, числа заполнения $n(x, t)$ будут велики. Это, как уже указывалось, область применимости классической электродинамики.

Если считать $n \gg 1$ и, кроме того, предположить, что выполнено неравенство

$$n^2 \gg \left| \frac{\partial n}{\partial x} \right|, \tag{70,3}$$

то уравнение (69,19) можно существенно упростить, отбросив малые (по сравнению с $n^2$) члены $n$ и $\dfrac{\partial n}{\partial x}$.

Впоследствии справедливость предположения (70,3) может быть проверена непосредственным вычислением.

Итак, имеем вместо (69,19)

$$\frac{\partial n}{\partial t'} \approx \frac{1}{x^2} \frac{\partial}{\partial x} (x^4 n^2), \tag{70,4}$$

где $t' = \dfrac{(\sigma N_e c)\, kT}{mc^2}\, t$.

Вводя новую неизвестную функцию $f = x^2 n(x, t)$, найдем

$$\frac{\partial f}{\partial t'} = \frac{\partial f^2}{\partial x}. \tag{70,5}$$

Решение последнего уравнения в характеристиках гласит:

$$x = F(f) - 2ft', \tag{70,6}$$

где вид функции $F(f)$ определяется начальными условиями.

Смысл полученного результата лучше всего понять на примере распределения, представленного на рис. 53. Согласно (70,6) все точки, расположенные на первоначальной кривой $f(x, 0) = x^2 n(x, 0)$ (кривая *1*) движутся по характеристикам — прямым, параллельным оси в направлениях уменьшающихся $x$ (кривая *2*) со скоростью, пропорциональной $f$. Время, в течение которого данная точка достигнет оси $f$, определяется, очевидно, выражением

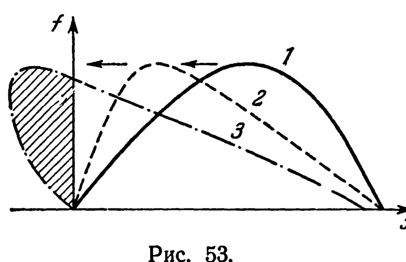



Рис. 53.

$$\tau = \frac{F(f)}{2f}. \qquad (70,7)$$

Решение (70,6) формально применимо при всех, как положительных, так и отрицательных значениях $x$. Поэтому с течением времени $f(x, t)$ должно принять вид изображенной на рис. 53 кривой *3*. Ясно, однако, что поскольку переменная $x$ представляет энергию фотонов, переход к отрицательным $x$ невозможен. Частицы, попавшие в состояние $x = 0$, т. е. в состояние с нулевой энергией, прекращают свое движение. Иными словами, фотоны накапливаются в состоянии с нулевой энергией, или, что то же самое, в состоянии бозе-конденсата.

Число частиц, перешедших в это состояние, определяется формально заштрихованной площадью на рис. 53. Необходимо, однако, подчеркнуть, что полученная картина кинетики перехода фотонов к состоянию с нулевой энергией неполна и не должна восприниматься буквально. В области очень низких частот всегда начинает играть существенную роль поглощение (см. § 68), как бы ни была мала концентрация электронного газа (точнее, плазмы). Если система (электронный газ + фотонный газ) предоставлена самой себе в течение достаточно большого промежутка времени, в ней, естественно, всегда установится статистическое равновесие и функция распределения фотонов станет планковской.

Поэтому не имело бы смысла искать стационарные решения уравнения (69,19) без учета тормозных процессов.

Однако динамика изменения спектра фотонов за те времена $t^*$ и в той области частот, в которой не проявляются тормозные процессы, дается приведенной формулой (70,6). Изменение начального распределения $n(x, 0)$ во времени иллюстрируют кривые, приведенные на рис. 53. Каждая из них представляет как бы мгновенную фотографию этого распределения при $t$, лежащем в интервале

$$0 < t \ll t^*.$$

Поскольку кинетика рассмотренного процесса существенно зависит от формы начального распределения, интересно разобрать случай, когда $f(x, 0)$ имеет вид, представленный на рис. 54. Согласно (70,6) функция $f(x, t)$ с течением времени будет деформироваться, как это показано на рис. 54. Скорость приближения к оси ординат будет тем больше, чем больше $f$. Верхние участки кривой выдвигаются вперед, а нижние оказываются отставшими. В результате функция распределения может настолько выгнуться, что кривая $f(x, t)$ окажется неоднозначной.

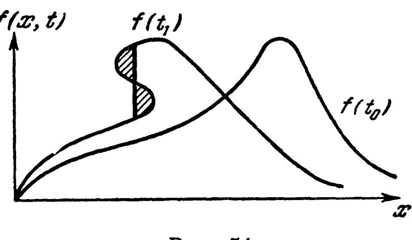


Рис. 54.

Возникает такая же ситуация, как при образовании ударных волн в однородном течении невязкой жидкости. В действительности, однако, $f(x, t)$ не становится многозначной. При приближении к отвесному (ударному) фронту производная $\frac{\partial n}{\partial x}$ неограниченно возрастает. При этом нарушается неравенство (70,3) и уравнение (70,4) становится неприменимым. Более того, изменение функции распределения вблизи фронта становится резким и неприменимо и общее уравнение (69,19). Детальная картина движения фронта $f(x, t)$ в этом случае оказывается гораздо более сложной.

По прошествии времени $t^*$ начинается второй этап эволюции. В результате процессов поглощения в системе фотонов устанавливается равновесное планковское распределение с температурой фотонов, равной температуре электронов $T_e$.

Обратимся теперь ко второму случаю, когда в начальный момент времени выполнено неравенство (70,2). Эволюция спектра фотонов также протекает в два этапа. На первом этапе, при $t < t^*$, в системе фотонов устанавливается распределение Бозе — Эйнштейна с химическим потенциалом, отличным от нуля. При этом средняя энергия фотонов становится равной средней энергии электронов. Затем вступают в игру процессы поглощения и излучения. Химический потенциал начинает изменяться во времени и по прошествии времени $\tau \gg t^*$ $\mu \to 0$, т. е. в системе фотонов устанавливается планковское распределение.

## § 71. Подвижность электрона в поле излучения

Прежде чем перейти к рассмотрению поведения системы электронов в поле излучения, следует обсудить важный вопрос о поведении одиночного свободного электрона в поле излучения,

Задача о поведении электрона в поле электромагнитной волны уже обсуждалась нами в § 36 ч. I. Мы видели, что электрон рассеивает падающую на него электромагнитную волну. Ясно, однако, что поскольку при рассеянии происходит передача импульса от волны к электрону, возникает некоторая средняя сила, действующая на частицу, излучающую вторичные (рассеянные) волны. Согласно (29,2) ч. I средняя (за период) сила, действующая на излучающую частицу (в системе отсчета, в которой частица покоится) равна

$$\boldsymbol{F}_0 = \frac{2}{3}\frac{e^2}{c^3}\overline{\frac{d^2\boldsymbol{v}}{dt^2}} \simeq \frac{2e^2}{3c^3}\overline{\left\{\frac{e\dot{\boldsymbol{E}}}{m} + \frac{e}{mc}[\dot{\boldsymbol{v}}\boldsymbol{H}]\right\}} \simeq$$

$$\simeq \frac{2e^4}{3m^2c^4}\overline{[\boldsymbol{E}\boldsymbol{H}]} = \frac{8\pi}{3}\left(\frac{e^2}{mc^2}\right)^2 \frac{\overline{\boldsymbol{E}^2}}{4\pi}\boldsymbol{l},$$

где $\boldsymbol{l}$ — единичный вектор в направлении распространения волны. Вводя томсоновское эффективное сечение рассеяния и плотность энергии излучения $u_0$, приходим к широко известной формуле для лучистого давления:

$$\boldsymbol{F}_0 = \sigma_T u_0 \boldsymbol{l} = \frac{\sigma}{c}\boldsymbol{q}, \qquad (71,1)$$

где $\boldsymbol{q}$ — поток энергии в одинарной волне. Сила, действующая на электрон, — сила лучистого давления, оказывается не зависящей от частоты. Поэтому силу, действующую на электрон со стороны спектрального поля, образуемого набором волн с различными значениями частоты, также можно представить в виде

$$\boldsymbol{F}_0 = \frac{\sigma_T}{c}\boldsymbol{q}. \qquad (71,2)$$

Здесь через $\boldsymbol{q}$ обозначен полный поток энергии в поле излучения

$$\boldsymbol{q} = \int c\hbar\omega n(\omega, \boldsymbol{l})\,\boldsymbol{l}\,d\boldsymbol{k} = \pi^2 c^4 \int \rho(\omega, \boldsymbol{l})\frac{\boldsymbol{l}}{\omega^2}\,d\boldsymbol{k}. \qquad (71,3)$$

Вместо плотности энергии мы ввели спектральную функцию.

При переходе от (71,1) к (71,2), т. е. при переходе от силы, действующей на электрон со стороны монохроматической волны, к такой же силе в спектральном поле излучения, молчаливо предполагалось, что имеет место аддитивность сил, действующих на электрон со стороны каждой из волн. При таком суммировании упускался из виду упомянутый выше эффект индуцированного рассеяния. При этом оказалось существенным следующее обстоятельство: если не учитывать ту часть изменения импульса $\Delta\boldsymbol{p}_2$, которая связана с изменением частоты при рассеянии, и которая, как мы подчеркивали [см. (68,9)], дает малый вклад в изменение импульса, а также не учитывать изме-

нение спектральной зависимости функции распределения при изменении частоты, то вклад индуцированного рассеяния в выражении для давления точно равен нулю.

С другой стороны, как показывает последующий расчет, учет изменения частоты при рассеянии и зависимости $n$ от $\omega$ приводит к существенному изменению формулы для давления.

Таким образом, ниже мы должны получить точное выражение для давления без каких-либо произвольных допущений. Под «точным» выражением мы понимаем выражение для давления в классическом нерелятивистском приближении (без учета квантовых и релятивистских поправок). При этом вычислении удобно (хотя в принципе и не обязательно) воспользоваться квантовым подходом, основанным на применении общей формулы для $a_i$. Переходя в окончательных формулах к классическому пределу $\hbar \to 0$, мы найдем классическое выражение для средней силы. На этом примере[1]) мы убедимся в полезности указанного в предыдущем параграфе методического приема — получения классических формул из квантовых в пределе $\hbar \to 0$. Согласно (69,8) средняя сила или подвижность дается общей формулой:

$$\langle \Delta \boldsymbol{p} \rangle = \int c\,(\Delta \boldsymbol{p}_1 + \Delta \boldsymbol{p}_2)\, n(\boldsymbol{k})\,[1 + n(\boldsymbol{k}')]\, d\sigma\, d\boldsymbol{k}. \tag{71,4}$$

Учтем теперь, что изменение частоты фотона $\Delta\omega$ при одиночном акте рассеяния на электроне мало́[2]). Соответственно положим $n(\boldsymbol{k}) \equiv n(\omega, \boldsymbol{l})$; $n(\boldsymbol{k}') \equiv n(\omega', \boldsymbol{l}')$, причем имеем приближенно:

$$n(\omega', \boldsymbol{l}') \simeq n(\omega, \boldsymbol{l}') + \frac{\partial n}{\partial \omega}(\omega' - \omega) = n(\omega, \boldsymbol{l}') - \frac{\partial n}{\partial \omega}\Delta\omega.$$

Вводя, кроме того, вместо чисел заполнения $n(\omega, \boldsymbol{l})$ спектральное распределение $\rho(\omega, \boldsymbol{l})$, имеем

$$\langle \Delta \boldsymbol{p} \rangle = \int \left\{ \frac{\hbar\omega}{c}(\boldsymbol{l} - \boldsymbol{l}') + \frac{\hbar}{c}(\Delta\omega)\boldsymbol{l}' \right\} \frac{\pi^2 c^3}{\hbar\omega^3}\rho(\omega, \boldsymbol{l}) \times \\ \times \left\{ 1 + \frac{\pi^2 c^3}{\hbar}\frac{\rho(\omega, \boldsymbol{l}')}{\omega^3} - \frac{\pi^2 c^3}{\hbar}\Delta\omega \frac{\partial}{\partial\omega}\left[\frac{\rho(\omega, \boldsymbol{l}')}{\omega^3}\right] \right\} c\, d\sigma\, d\boldsymbol{k} = \\ = \int \left\{ \frac{\hbar\omega}{c}(\boldsymbol{l} - \boldsymbol{l}') + \frac{\hbar^2\omega^2}{mc^3}\boldsymbol{l}'(1 - \boldsymbol{l}\boldsymbol{l}') \right\} \frac{\pi^2 c^4}{\hbar\omega^3}\rho(\omega, \boldsymbol{l}) \left\{ 1 + \frac{\pi^2 c^3}{\hbar}\frac{\rho(\omega, \boldsymbol{l}')}{\omega^3} - \right. \\ \left. - \frac{\pi^2 c^3}{\hbar}\Delta\omega\frac{\partial}{\partial\omega}\left[\frac{\rho(\omega, \boldsymbol{l}')}{\omega^3}\right] \right\} \frac{2\omega^2\, d\omega}{(2\pi c)^3}\, d\Omega_k \sigma\, d\Omega, \tag{71,5}$$

---

[1]) См. П. Парадоксов, УФН 89, 707 (1966).

[2]) Напоминаем, что здесь удобно пользоваться системой покоящегося электрона $K_0$. Индекс нуль для простоты опускается.

где $d\Omega_k$ — элемент телесного угла для падающего фотона, а вместо $\Delta\omega$ подставлено значение (68,11).

Перейдем теперь к пределу $\hbar\to 0$ в формуле (71,5).

Для этого в ней нужно удержать все слагаемые, не содержащие $\hbar$. При этом для полной силы, действующей на электрон, получаем:

$$\langle\Delta\boldsymbol{p}\rangle = \int \sigma\frac{\pi^2c^3}{\omega^2}\rho(\omega,\boldsymbol{l})(\boldsymbol{l}-\boldsymbol{l}')\,d\boldsymbol{k}\,d\Omega + \int \sigma\frac{\pi^4 c}{m\omega^2}\rho(\omega,\boldsymbol{l})\rho(\omega,\boldsymbol{l}')\boldsymbol{l}'(1-\boldsymbol{l}\boldsymbol{l}')\frac{d\omega}{4\pi^3}\,d\Omega_k\,d\Omega - \int\sigma\frac{\pi^4 c}{m}\rho(\omega,\boldsymbol{l})\frac{\partial}{\partial\omega}\left[\frac{\rho(\omega,\boldsymbol{l})}{\omega^3}\right](\boldsymbol{l}-\boldsymbol{l}')\,\omega^2(1-\boldsymbol{l}\boldsymbol{l}')\frac{d\omega}{4\pi^3}\,d\Omega_k\,d\Omega = \boldsymbol{F}_{\text{sp}}+\boldsymbol{F}_{\text{ind}}. \quad (71,6)$$

Подчеркнем, что $\langle\Delta\boldsymbol{p}\rangle$ представляет среднюю силу в классическом приближении. Поэтому точно такое же выражение можно было бы получить из классической электродинамики в результате вычислений, аналогичных (68,8). Вместе с тем нужно иметь в виду, что в рамках классической теории нами не было использовано никакого разложения по малому параметру.

Рассмотрим каждое из слагаемых в (71,6) порознь. Первое слагаемое можно представить в виде:

$$\boldsymbol{F}_{\text{sp}} = \int\sigma\frac{\pi^2c^3}{\omega^2}\rho(\omega,\boldsymbol{l})(\boldsymbol{l}-\boldsymbol{l}')\,d\boldsymbol{k}\,d\Omega = \sigma_T\pi^2c^3\left(\int\rho(\omega,\boldsymbol{l})\frac{d\omega}{c^3 4\pi^3}\,d\Omega_k\right)\boldsymbol{l} = \boldsymbol{F}_0. \quad (71,7)$$

Мы видим, что $\boldsymbol{F}_{\text{sp}}$ представляет силу, обусловленную спонтанным рассеянием. Она совпадает с приведенным выше выражением для силы давления излучения $\boldsymbol{F}_0$. Второе слагаемое,

$$\boldsymbol{F}_{\text{ind}} = \int\frac{\sigma c\pi}{4m}\frac{\rho(\omega,\boldsymbol{l})\rho(\omega,\boldsymbol{l}')}{\omega^2}\boldsymbol{l}'(1-\boldsymbol{l}\boldsymbol{l}')\,d\omega\,d\Omega_k\,d\Omega - \int\frac{\sigma\pi c}{4m}\rho(\omega,\boldsymbol{l})\frac{\partial}{\partial\omega}\left[\frac{\rho(\omega,\boldsymbol{l}')}{\omega^3}\right](\boldsymbol{l}-\boldsymbol{l}')\,\omega^2(1-\boldsymbol{l}\boldsymbol{l}')\,d\omega\,d\Omega_k\,d\Omega, \quad (71,8)$$

как видно из его структуры, представляет силу, обусловленную индуцированным рассеянием. Эта сила содержит под знаком интеграла произведения спектральных функций падающего и рассеянного излучения $\rho(\omega,\boldsymbol{l})$ и $\rho(\omega,\boldsymbol{l}')$. Характер силы $\boldsymbol{F}_{\text{ind}}$ зависит от вида функции $\rho(\omega,\boldsymbol{l})$. Если, в частности, излучение представляет совокупность волн одного направления, то $\rho(\omega,\boldsymbol{l}')=0$, и индуцированная сила автоматически обращается в нуль.

Если $\rho(\omega,\boldsymbol{l})$ представляет равновесное планковское распределение $\rho_{\text{п}}(\omega)$, то после подстановки выражения $\rho_{\text{п}}(\omega)$ и

простых вычислений получается

$$\boldsymbol{F}_{\text{ind}} \sim \frac{kT}{mc^2} \boldsymbol{F}_{\text{sp}}. \tag{71,9}$$

Поскольку в нерелятивистской области температура излучения $kT \ll mc^2$, $\boldsymbol{F}_{\text{ind}}$ представляет малую поправку к спонтанной силе $\boldsymbol{F}_{\text{sp}}$.

Наоборот, в неравновесном поле излучения высокой интенсивности $\boldsymbol{F}_{\text{ind}}$ может быть сравнимо и даже существенно больше $\boldsymbol{F}_{\text{sp}}$. Таким образом, в общем случае $\boldsymbol{F}_{\text{ind}}$ отнюдь не является малой поправкой к $\boldsymbol{F}_{\text{sp}}$.

Рассмотрим индуцированную силу давления при некоторых конкретных видах спектрального распределения. Пусть, например, излучателем служит однородная поверхность диска радиусом $R$. Поскольку все точки диска излучают одинаково, функцию $\rho(\omega, \boldsymbol{l})$ можно представить в виде

$$\rho(\omega, \boldsymbol{l}) = G(\omega)\,\varphi(\boldsymbol{l}), \tag{71,10}$$

где первый множитель характеризует частотное, а второй — пространственное распределение излучения. Выражение для $\boldsymbol{F}_{\text{ind}}$ приобретает особенно наглядный вид, если задаться простой формой $G(\omega)$, например,

$$G(\omega) = \begin{cases} \dfrac{a}{\omega^{\gamma}}, & \omega_0 \leqslant \omega < \infty, \\ 0, & \omega < \omega_0. \end{cases} \tag{71,11}$$

Кстати, именно таким спектральным распределением обладают некоторые астрономические источники мощного излучения.

Тогда подстановка (71,10) и (71,11) в (71,8) дает

$$\boldsymbol{F}_{\text{ind}} = \frac{a^2 c\pi}{4m} \int\limits_{\omega_0}^{\infty} \frac{d\omega}{\omega^{2\gamma+2}} \int \varphi(\boldsymbol{l}')\,(\boldsymbol{l})\,\boldsymbol{l}'\,(1 - \boldsymbol{l}\boldsymbol{l}')\,d\Omega_k\,d\Omega. \tag{71,12}$$

Второй интеграл в (71,12) обращается в нуль, поскольку его угловая часть изменяет знак при замене $\boldsymbol{l} \to -\boldsymbol{l}'$.

Для диска, на большом расстоянии $r \gg R$ от его поверхности, можно написать

$$\varphi(\boldsymbol{l}) = \varphi(\beta, \psi) = \Theta(\cos\beta - \cos\beta_0) \cong \Theta(\beta^2 - \beta_0^2), \tag{71,13}$$

где $\beta$ и $\psi$ — полярный и азимутальный углы, а $\Theta$ — ступенчатая функция, $\beta_0$ — угол раствора конуса $\beta_0 = \frac{r}{R} \ll 1$. Тогда вычисление (71,12) дает для силы

$$\boldsymbol{F}_{\text{ind}} = \frac{3\sigma_T \pi^2 (\gamma - 1)\,\beta_0^2}{8m\omega_0^3 (2\gamma + 1)\,c}\, q \cdot \boldsymbol{q}. \tag{71,14}$$

Мы видим, что $|\boldsymbol{F}_{\text{ind}}|$ оказывается пропорциональной $q^2$ и при

больших значениях потоков излучения (и при малых значениях $\omega_0$) может оказаться существенно большей, чем $|\boldsymbol{F}_{\text{sp}}|$.

В качестве второго интересного примера рассмотрим силу давления в резко анизотропном поле. В качестве такого источника выберем два встречных потока излучения. Пусть один из них является когерентным (монохроматическим), направленным в положительную сторону оси $z$

$$n_1(\omega) = I_1 \delta(\omega - \omega_0). \tag{71,15}$$

Второй пучок, направленный в отрицательную сторону оси $z$, характеризуется некоторым спектральным распределением $n_2(\omega)$.

Пользуясь общей формулой (71,8) для индуцированного давления, после вычислений приходим к формуле для компонента силы $F^{(z)}_{\text{ind}}$:

$$F^{(z)}_{\text{ind}} \sim \frac{\hbar^2 \sigma}{mc^5} I_1 \omega^{3/2} \left\{ \frac{\partial}{\partial \omega} [n_2(\omega)\, \omega^{3/2}] \right\} \Big|_{\omega=\omega_0}. \tag{71,16}$$

Формула (71,16) показывает, что $F^{(z)}_{\text{ind}}$ может иметь как положительный, так и отрицательный знак, в зависимости от значения производной

$$\left\{ \frac{\partial}{\partial \omega} [n_2(\omega)\, \omega^{3/2}] \right\} \Big|_{\omega=\omega_0}.$$

Спонтанная сила $\boldsymbol{F}_{\text{sp}}$ в рассматриваемом случае всегда направлена в сторону того из пучков, интенсивность которого выше и, соответственно, больше поток энергии $\boldsymbol{q}$. Таким образом, в зависимости от знака указанной величины и соотношения между абсолютными значениями $F_{\text{ind}}$ и $F_{\text{sp}}$, могут реализоваться два случая: 1) когда результирующее давление направлено по вектору полной энергии двух пучков излучения; 2) когда результирующая сила направлена против полного потока излучения.

В заключение приведем выражение для силы спонтанного давления, действующей на движущийся электрон при $v \ll c$. Она получается из (71,3) путем преобразования Лоренца для частоты при $v \ll c$ (доплер-эффект!).

Тогда

$$\boldsymbol{F}_{\text{sp}} = -\frac{4}{3} \frac{\sigma_T u_0}{c} \frac{\boldsymbol{p}}{m}. \tag{71,17}$$

Аналогично, индуцированная сила имеет вид

$$\boldsymbol{F}_{\text{ind}} = \frac{\sigma_T \pi^2}{m^2} \boldsymbol{p} \left[ \frac{13}{2} \int \left[ \frac{\rho(\omega)}{\omega} \right]^2 d\omega - \frac{14}{15} \int \left\{ \frac{\partial}{\partial \omega} \left[ \frac{\rho(\omega)}{\omega^3} \right] \right\}^2 \omega^6\, d\omega \right]. \tag{71,18}$$

## § 72. Система электронов в произвольном поле излучения

Мы теперь можем перейти к нахождению стационарного неравновесного распределения системы электронов, помещенных в заданное поле излучения. Будем считать, что поле излучения является изотропным. При этом функция распределения $n$ зависит только от частоты, но не от направления волнового вектора, т. е. $n = n(\omega)$. В этом простом случае можно наглядно продемонстрировать основные положения теории.

Из (69,4) для стационарного распределения находим

$$-\frac{\partial}{\partial p_i} D_i f + a_i f = j_L, \tag{72,1}$$

где $j_L$ определено формулой (34,8).

Для получения решения (72,1), помимо подвижности, найденной ранее, необходимо знать коэффициент диффузии $D_i = D$. Как и подвижность, коэффициент диффузии является, вообще говоря, функцией импульса.

Для наших целей в выражении для подвижности $a_i$ можно ограничиться приближением

$$a_i = \langle \Delta p_i \rangle \simeq F_{\text{sp}}^{(i)}, \tag{72,2}$$

где $F_{\text{sp}}^{(i)}$ дается формулой (71,17). Причина этого заключается в следующем: как мы увидим в дальнейшем, электроны в поле излучения могут приобретать, вообще говоря, очень высокие энергии. Оказывается, что если слагаемое $\boldsymbol{F}_{\text{ind}}$ в выражении для подвижности (71,6) становится сравнимым с $\boldsymbol{F}_{\text{sp}}$, то приобретаемая средняя энергия электрона становится порядка $mc^2$. Однако, как мы это подчеркивали с самого начала, вся излагаемая теория ограничена случаем нерелятивистских электронов.

При вычислении коэффициента диффузии по формуле (69,7) можно ограничиться учетом изменения импульса электрона лишь в результате совершенно упругого рассеяния. Учет неупругости рассеяния дает квантовую поправку. Расчет коэффициента диффузии удобно провести в системе отсчета покоящегося электрона

$$D = \langle \Delta p_i^2 \rangle = \frac{c}{3} \int \sigma n_0(\omega_0) \left[1 + n_0(\omega_0')\right] (\Delta \boldsymbol{p})^2 \, d\boldsymbol{k}_0 \, d\Omega =$$

$$= \frac{c}{3} \int \sigma \left(\frac{\hbar\omega_0}{c}\right)^2 (\boldsymbol{l} - \boldsymbol{l}')^2 \, n_0(\omega_0) \left[1 + n_0(\omega_0')\right] d\boldsymbol{k}_0 \, d\Omega, \tag{72,3}$$

где индексом нуль снабжены число фотонов и их частота в выбранной системе координат.

При переходе к лабораторной системе отсчета следует провести преобразование Лоренца. Оказывается, однако, что при вычислении коэффициента диффузии в нерелятивистском приближении следует учитывать только члены нулевого порядка малости по величине $p/mc$. Это связано с тем, что в уравнении (72,1) диффузионный коэффициент стоит перед производной $\frac{\partial f}{\partial p_i}$. В результате, как мы увидим ниже, при учете слагаемых порядка $p/mc$ в $a_i$, в $D$ следует учитывать лишь члены, не зависящие от $p$. При этом автоматически $\frac{\partial}{\partial p_i}(Df)$ окажется того же порядка малости, что и $a_i f$.

В соответствии с этим можно положить

$$n_0(\omega_0) = n(\omega) = n\left(\omega_0 + \omega_0 \frac{p\cos\theta}{mc}\right) \approx n(\omega_0) + \frac{\partial n}{\partial \omega_0}\cdot\omega_0\frac{p}{mc}\cos\theta$$

и для $D$ получаем

$$D = \int \frac{c}{3}\left(\frac{\hbar\omega}{c}\right)^2 (\cos\theta - \cos\theta')^2 n(\omega)[1+n(\omega)]\,\sigma\, d\Omega\, d\boldsymbol{k} = \\ = \frac{4\pi\sigma_T c}{3}\int\left(\frac{\hbar\omega}{c}\right)^2 n(\omega)[1+n(\omega)]\frac{\omega^2\, d\omega}{(2\pi c)^3}. \qquad (72,4)$$

При подстановке (72,2) и (72,4) в (72,1) получаем окончательно уравнение для функции распределения электронов:

$$\left\{\frac{4\pi\sigma_T c}{3}\int\left(\frac{\hbar\omega}{c}\right)^2 n[1+n]\frac{\omega^2\, d\omega}{(2\pi c)^3}\right\}\frac{\partial f}{\partial p} + \\ + \left\{\frac{16}{3}\frac{\sigma_T\pi}{cm}\int \hbar\omega n\frac{\omega^2\, d\omega}{(2\pi c)^3}\right\} pf + j_L = 0. \qquad (72,5)$$

Будем пытаться искать решение уравнения (72,5) в виде распределения Максвелла с некоторой эффективной температурой $\theta$, т. е. положим

$$f \sim e^{-\frac{p^2}{2m\theta}}. \qquad (72,6)$$

Как мы видели в § 34, максвелловское распределение автоматически обращает в нуль интеграл $j_L$ (при любом значении температуры). Поэтому уравнению (72,5) можно удовлетворить, положив

$$\theta = \frac{\int n(\omega)[1+n(\omega)](\hbar\omega)^2\omega^2\, d\omega}{4\int n(\omega)\hbar\omega\omega^2\, d\omega}. \qquad (72,7)$$

При найденном значении эффективной температуры максвелловское распределение представляет точное решение кинетического уравнения (72,1).

## § 73. Обсуждение результатов и область применимости теории

Подводя итог сказанному, следует прежде всего отметить замечательную особенность силы индуцированного давления: эта систематическая сила возникает в результате действия стохастического электромагнитного поля.

Чтобы яснее представить себе взаимоотношение между спонтанной и индуцированной силами давления излучения, удобно ввести понятие яркостной температуры. Яркостная температура определяется следующей формулой:

$$kT_{br}(\omega) = \frac{\pi^2 c^2 \rho(\omega, l)}{\omega^2}.$$

Для равновесного излучения $T_{br}$ тождественно совпадает с температурой излучения и пропорциональна энергии излучения. Пусть, однако, спектр излучения является неравновесным и при низких частотах его интенсивность выше, чем интенсивность равновесного излучения. Тогда $T_{br}$ представляет температуру того равновесного излучения, у которого спектральное распределение при низких частотах совпадает с неравновесным. Ясно, что если интенсивность излучения при низких частотах значительно выше равновесной, то яркостная температура может быть очень высока. При этом, однако, она не зависит от средней энергии излучения. Как видно из (71,13) по порядку величины

$$|\boldsymbol{F}_{\text{ind}}| \sim \sigma u_0 \frac{kT_{br}(\omega)}{mc^2} \beta^2 \sim |\boldsymbol{F}_{\text{sp}}| \frac{kT_{br}}{mc^2} \beta^2. \tag{73,1}$$

В случае равновесного излучения $|\boldsymbol{F}_{\text{ind}}| \sim \frac{kT}{mc^2} |\boldsymbol{F}_{\text{sp}}| \ll |\boldsymbol{F}_{\text{sp}}|$. Наоборот, если спектр неравновесного излучения таков, что $kT_{br} \gg mc^2$, то $|\boldsymbol{F}_{\text{ind}}| \gg |\boldsymbol{F}_{\text{sp}}|$.

Переходя к вопросу о нагреве электронов в поле излучения, подчеркнем, что физический смысл полученного результата — существование максвелловского распределения с температурой (72,7) — заключается в следующем: при малых передачах импульса в элементарном акте взаимодействия движение электрона в импульсном пространстве представляет броуновское блуждание. По прошествии некоторого времени релаксации система электронов, помещенная в изотропное поле излучения, приходит в стационарное состояние. У электронов устанавливается случайное (гауссовское) распределение по импульсам при произвольном распределении квантов по частоте $n(\omega)$. Это случайное распределение в изотропном поле является максвелловским с модулем (температурой) $\theta$. В равновесном поле излучения, когда $n(\omega)$ задается формулой Планка, пользуясь формулой (72,7), получаем очевидный результат $\theta = T$, т. е. равенство тем-

ператур излучения и электронов. Если, однако, распределение квантов имеет неравновесный характер, то эффективная температура электронов оказывается зависящей от вида функции $n(\omega)$.

Интересным является случай, когда распределение $n(\omega)$ имеет максимум в области сравнительно низких частот. Тогда в основной части спектра, при низких частотах, числа заполнения $n$ велики по сравнению с единицей. В формуле (72,7) можно перейти к классическому пределу $\hbar \to 0$. При этом

$$\theta \sim \frac{\int n (\hbar\omega)^2 \omega^2 d\omega}{4 \int n (\hbar\omega) \omega^2 d\omega} \sim \frac{\pi^2 c^3}{u_0} \int \frac{[\rho(\omega)]^2 d\omega}{\omega^2}. \tag{73,2}$$

Основную роль в передаче энергии электронам в этом случае играет индуцированный комптон-эффект.

Нагрев электронов излучением имеет чисто классический характер. Поэтому формула (73,2), как и выражение (71,8), могла бы быть получена из классической электродинамики при рассмотрении набора энергии в спектральном поле излучения. По поводу (73,2) необходимо сделать следующие три замечания.

1. При значительной спектральной плотности излучения в низкочастотном максимуме температуры электронов могут оказываться чрезвычайно высокими, так что средняя энергия электронов может оказаться гораздо больше средней энергии квантов. Подчеркнем, что нагрев осуществляется именно низкочастотным излучением. Хотя передача энергии при каждом акте рассеяния низкочастотных квантов мала, их число столь велико, что общая передача энергии системе электронов оказывается большой.

2. Легко видеть, что температура электронов $\theta$ по порядку величины совпадает с максимальной яркостной температурой излучения, причем всегда $\theta \leqslant kT_{br}$. Поэтому допущенное нами пренебрежение слагаемыми, связанными с изменением частоты кванта при рассеянии, т. е. использование формулы (68,10), оказывается неоправданным как раз тогда, когда температура $\theta$ достигает релятивистских значений и формула (72,5) становится неприменимой.

3. При фактическом вычислении интеграла в числителе (73,2) нужно иметь в виду, что в области очень низких частот тормозные процессы начинают преобладать над процессами рассеяния. Поэтому расходимость в (73,2) возникнуть не может.

Перейдем теперь к обсуждению области применимости полученных формул. Однако сперва следует более подробно обсудить поведение электрона в сильной монохроматической волне. Под «сильной» волной мы понимаем следующее: в § 36 ч. I при выводе формулы Томсона мы считали, что волна рассеивается не-

подвижным электроном, который приобретает в волне колебательную скорость $v \sim \frac{eE}{m\omega}$. При увеличении напряженности электрического поля $E$ скорость электрона в волне возрастает и может стать релятивистской. В сильном поле при $v \sim c$ поведение электрона в волне радикально изменяется. Под действием магнитного поля он будет совершать вращательное движение, так что полная его траектория будет представлять собой замкнутую кривую. На этой траектории электрон будет излучать электромагнитные волны с разнообразными частотами, отличными от частоты падающей волны. При этом сечение рассеяния электрона оказывается отличным от томсоновского. Его можно найти из простых энергетических соображений. Согласно (71,1) энергия, приобретаемая в единицу времени электроном в волне при $v \sim c$, по порядку величины равна $\sigma u_0 c$[1]). С другой стороны, потеря энергии на излучение в магнитном поле (при $v \sim c$) дается формулой (26,12) (см. т. I). В стационарном состоянии эти потери уравниваются. При этом для сечения находим

$$\sigma \sim \frac{1}{u_0 c}\left(\frac{d\varepsilon}{dt}\right)_{\text{изл}} \sim \frac{\sigma_T v^2 H^2}{u_0 c^2} \sim \left(\frac{eE}{m\omega c}\right)^2 \sigma_T = \alpha^2 \sigma_T,$$

где $\alpha = (eE/m\omega c)$. Мы видим, что сечение рассеяния должно быстро расти с увеличением напряженности поля. Рост сечения не может быть, однако, беспредельным, поскольку приобретаемая электроном энергия (в единицу времени) не может превысить величину $eEc$ работы поля за 1 *сек* над электроном, движущимся со скоростью света. Поэтому всегда $\alpha^2 \sigma_T c E < eEc$. При $\alpha \sim (\lambda/r_0)^{1/3}$, где $\lambda$ — длина волны и $r_0$ — классический радиус электрона, сечение начинает убывать как $1/E$. Значение $\alpha \lesssim 1$ ограничивает область применимости томсоновской теории рассеяния свободными электронами. Электрон в поле сильной волны нельзя более считать свободным. Эти результаты на квантовом языке можно интерпретировать следующим образом: в поле слабой волны наиболее вероятным процессом было одноквантовое рассеяние, т. е. обычный комптон-эффект; в поле сильной волны наиболее вероятным процессом становится многоквантовое рассеяние, при котором число квантов в акте рассеяния уже не сохраняется (излучаются частоты, отличные от частоты волны).

Переходя теперь к обсуждению границ применимости изложенной теории, заметим, что первым, очевидным условием применимости служит требование, чтобы характерное время набора

[1]) Следует заметить, что мы пользуемся для передачи энергии электрона энергией электрона в сопутной системе отсчета. Это законно потому, что вращательное движение электрона не приводит в среднем (за период) к приобретению какой-либо энергии.

энергии $\tau$ электроном было мало по сравнению с обратной характерной частотой спектра. В противном случае поле излучения не могло бы рассматриваться как случайное.

Оценим характерное время набора или, что то же самое, время торможения электрона в спектральном поле излучения. Для простоты будем считать последнее изотропным. Тогда имеем по порядку величины для $v \sim c$

$$\tau \cdot |\boldsymbol{F}_{\text{ind}}| \sim mc. \tag{73,3}$$

Следовательно, должно выполняться неравенство $\frac{mc}{|\boldsymbol{F}_{\text{ind}}|} < \frac{1}{\omega}$. Пользуясь (71,13), мы приходим к неравенству $\alpha < 1$, которое совпадает с условием применимости теории спонтанного рассеяния на свободных электронах.

Вторым ограничением применимости теории индуцированного рассеяния служит неравенство

$$|\boldsymbol{F}_{\text{ind}}| \cdot c < eEc. \tag{73,4}$$

Подставляя значение $|\boldsymbol{F}_{\text{ind}}|$, снова приходим к неравенству $\alpha < 1$. Этот результат показывает, что в случае индуцированного рассеяния увеличение сечения по сравнению с томсоновским не может иметь места независимо от значения параметра $\alpha$. Подчеркнем, что оба условия применимости теории индуцированного рассеяния в спектральном поле являются совершенно независимыми. В то время как первое из них выражает самую суть понятия спектрального поля, второе связано с существованием предельной скорости распространения взаимодействий. При стремлении параметра $\alpha$ к единице сечение индуцированного рассеяния, как видно из (73,4), начинает падать по закону $\sigma_{\text{эфф}}^{\text{ind}} \sim 1/E^2$.

В рамках этой книги мы не можем остановиться на ряде приложений, которые получила изложенная теория в астрофизике [1]).

Приведенные результаты касаются одной из сторон бурно развивающейся новой области кинетики, именуемой обычно нелинейной теорией плазмы.

На приведенных примерах читатель мог увидеть, как переход к высокоинтенсивным полям даже в простейших системах приводит к новым, совершенно своеобразным ситуациям, не сходным с теми, которые известны в области слабых полей. Вместе с тем читатель мог убедиться в неисчерпаемости классической физики и мощи методов квантовой теории.

---

[1]) См., например, Е. В. Левич, Р. А. Сюняев, Astroph. Lett. 7, 69 (1971); Р. А. Сюняев, Астрон. ж. 48, 244 (1971).

В. Г. ЛЕВИЧ
Ю. А. ВДОВИН
В. А. МЯМЛИН




# ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

Том II